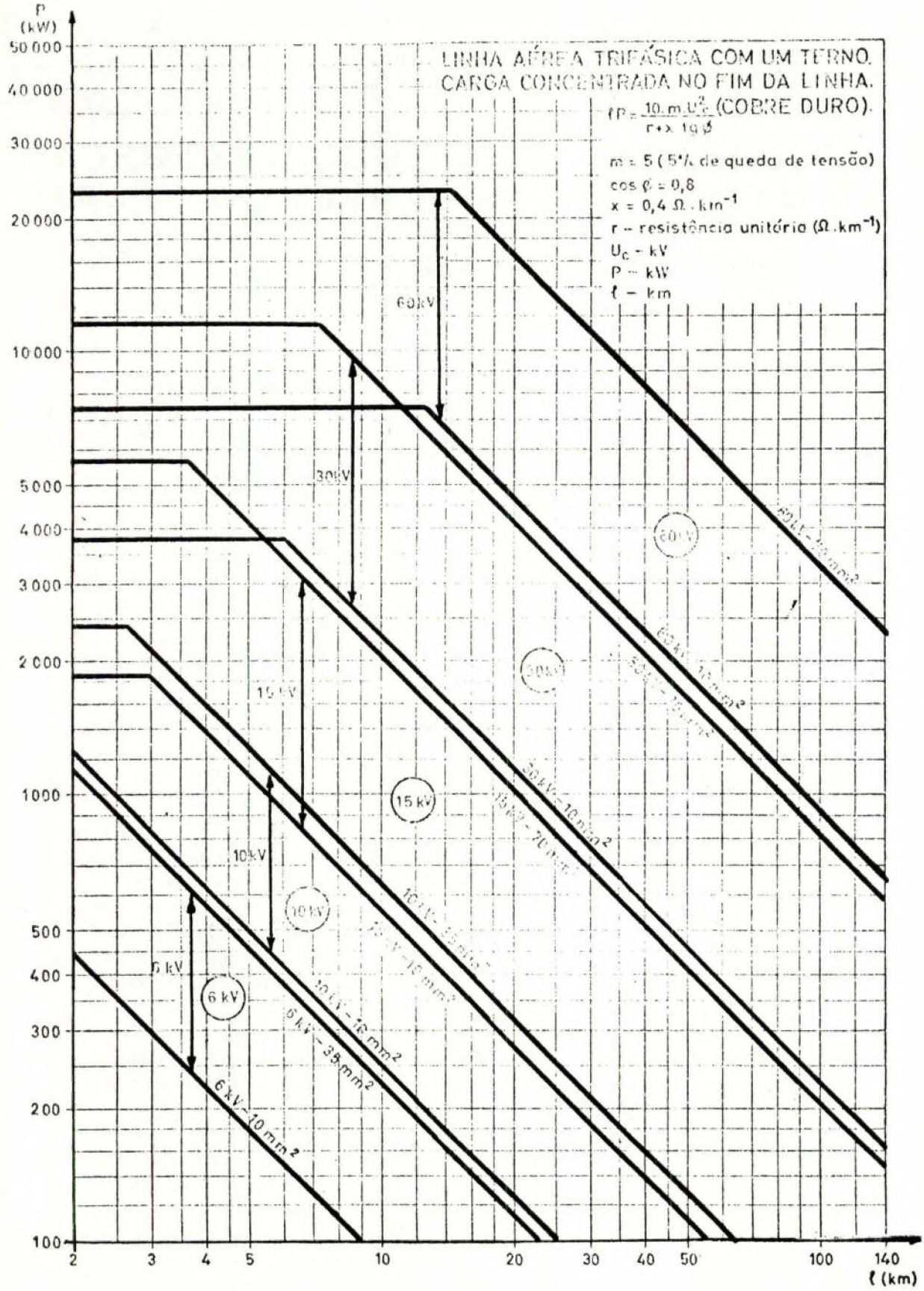
ANEXO
Domínios de utilização das médias tensões



AUTOMATIZAÇÃO DO MÉTODO DAS FORÇAS NA ANÁLISE DE PÓRTICOS RECTANGULARES

J.A. TEIXEIRA DE FREITAS* e E.M.B. RIBEIRO PEREIRA**

SUMÁRIO

Apresenta-se uma formulação para a análise de pórticos rectangulares em computador. Demonstra-se que o número de operações necessárias para realizar a análise pelo método das forças é significativamente inferior ao exigido pelo método dos deslocamentos. Fornecem-se expressões analíticas para todos os operadores intervenientes e descrevem-se as principais fases do algoritmo.

INTRODUÇÃO

O método dos deslocamentos e o método das forças são os métodos que tradicionalmente se utilizam para realizar a análise elástica de estruturas reticuladas.

O método dos deslocamentos explora o *grau de indeterminação cinemática* da estrutura, β.

Bloqueando os β *deslocamentos indeterminados* q, determinam-se as forças Q_o que equilibram a solicitação. A equação do método

$$K\ q + Q_o = 0 \qquad (1)$$

é obtida obrigando que essas forças equilibrem as provocadas pelos deslocamentos na ausência de qualquer outra solicitação; K é portanto a *matriz de rigidez* da estrutura.

O método das forças baseia-se na ideia complementar de explorar o *grau de indeterminação estática* da estrutura, α.

Introduzindo α libertações na estrutura, determinam-se os deslocamentos relativos que aí se desenvolvem, v_o, quando se aplica a solicitação. A equação do método

$$F\ p + v_o = 0 \qquad (2)$$

é obtida obrigando que esses deslocamentos sejam anulados pelas *forças hiperstáticas* correspondentes p; F é portanto a *matriz de flexibilidade* da estrutura.

ESCOLHA DO MÉTODO DE CÁLCULO

É usual preterir o método das forças em favor do método dos deslocamentos quando se pretende realizar em computador a análise de estruturas reticuladas.

Esta opção é baseada em dois argumentos. O primeiro é a facilidade de gerar automaticamaente a matriz de rigidez da estrutura, assim como o vector das forças nodais. O segundo é a economia que se pode garantir na solução numérica do sistema se se explorar o facto de a matriz de rigidez ser simétrica e bandeada, se se escolher uma numeração apropriada para os deslocamentos nodais.

Como adiante se poderá verificar, é também possível gerar automaticamente a equação de método das forças recorrendo a uma técnica análoga à utilizada na versão directa do método dos deslocamentos; a matriz de flexibilidade da estrutura é construída por colocação directa da matriz de flexibilidade de cada barra que a compõe, e cuja definição geral se fornece ao programa.

Será ainda demonstrado que, tal como a matriz de rigidez, a matriz de flexibilidade para além de ser simétrica é também bandeada.

Admitindo portanto que ambos os métodos são

(*) Professor Aassociado, IST.
(**) Aluno Tarefeiro, IST.
Original recebido para publicação em 8/2/84

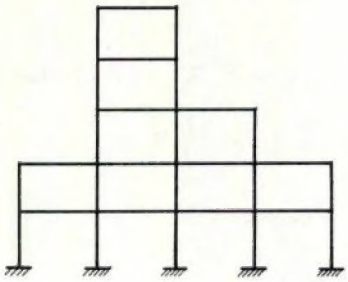


FIG. 1

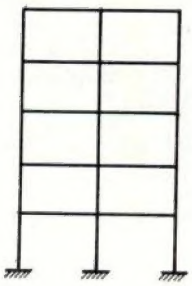


FIG. 2

qualitativamente idênticos, tanto no que respeita à facilidade da montagem automática das equações em que se baseiam, como quanto à estrutura dos próprios sistemas, interessa finalmente comparar o tempo de cálculo necessário à solução numérica do sistema resolutivo associado a cada um destes dois métodos.

Como termo de comparação, considerem-se pórticos rectangulares do tipo do representado na figura 1.

Se V representar o número de vãos, P_k o número de pisos do vão k e

$$P'_k = \max \{P_k , P_{k+1}\}$$

conclui-se que

$$B = P_1 + P_V + \sum_{k=1}^{V-1} P'_k + \sum_{k=1}^{V} P_k$$

$$N = P_1 + P_V + \sum_{k=1}^{V-1} P'_k$$

em que B é o número de barras e N o número de nós livres.

O grau de indeterminação cinemática da estrutura é definido por

$$\beta = 3\,N$$

e o grau de indeterminação estática por

$$\alpha = 3\,(B - N)$$

As expressões acima mostram que a dimensão do sistema do método das forças é sempre inferior à do método dos deslocamentos ($B \leqslant 2\,N$).

A dimensão da semi-banda é definida por

$$b \leqslant 3 + 3\,.\min\{\max\,(P_k)\,, V'\}$$

em que $V' = V$ para a equação do método das forças e $V' = V + 1$ para a do método dos deslocamentos.

A dimensão da semi-banda da matriz de flexibilidade nunca é, portanto, superior à dimensão da semi-banda da matriz de rigidez da mesma estrutura.

Como o número de operações numéricas necessárias à solução de um sistema simétrico de dimensão D e semi-banda b é definido |1| por

$$T = (3D - 2b)\;b^2/6 \qquad (3)$$

concluiu-se que, para um dado pórtico, rectangular, o tempo dispendido na solução da equação do método dos deslocamentos é sempre superior ao necessário para a solução da equação do método das forças. Esta diferença é ainda maior se a rotina utilizada não explorar o bandeamento da matriz, situação em que na equação (3) a dimensão da maior semi-banda iguala a dimensão do sistema (b = D).

No caso particular dos pórticos regulares como o representado na figura 2 ($P'_i = P$, sendo P o número de pisos) as definições acima formam as seguintes expressões

$$\alpha = 3PV\,, \beta = 3P\;(V + 1)$$

A relação entre o número de operações necessárias para a solução das equações do método dos deslocamentos, T_β, e do método das forças, T_α, está representada nos diagramas das figs. 3 e 4 para vários valores do número de vãos e de pisos em que $R = T_\beta / T_\alpha$.

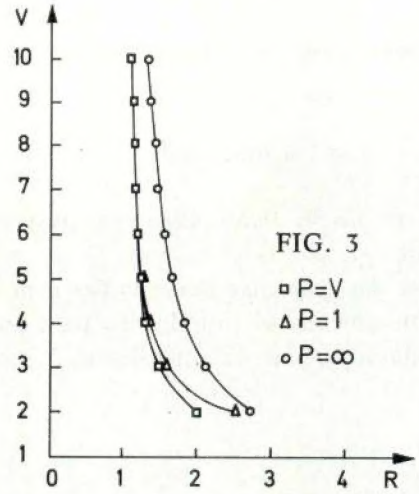


FIG. 3

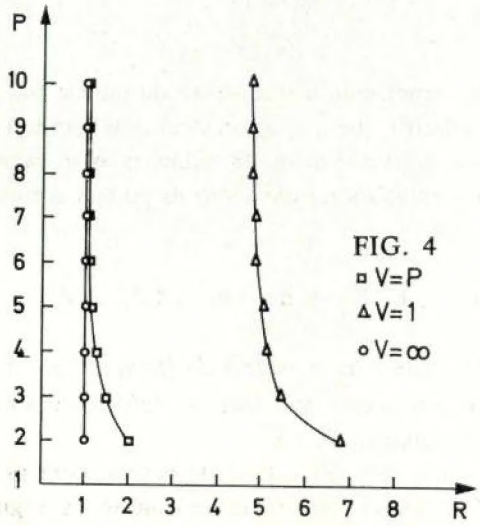


FIG. 4

EQUAÇÃO DO MÉTODO DAS FORÇAS

Seja

$$X = \{X_m\}\ , m = 1,2,\ldots, B \qquad (4)$$

o vector dos *esforços independentes*, isto é, os esforços necessários e suficientes para caracterizar o estado de tensão em qualquer secção da estrutura.

Tornando a estrutura isostática através da introdução de α libertações onde se aplicam as forças hiperstáticas

$$p = \{p_k\}\ , k = 1,2,\ldots, \alpha \qquad (5)$$

encontra-se a seguinte definição para condição de equilíbrio da barra m

$$X_m = B_m\ p + X_{om} \quad m = 1,2,\ldots, B \qquad (6)$$

em que a coluna j da matriz B_m representa a distribuição de esforços que equilibra a força hiperstática $p_j = 1$ e X_{om} é o vector que lista os esforços causados pelo carregamento.

Seja

$$v = \{v_1\ , v_2\ ,\ldots,\ v_\alpha\} \qquad (7)$$

o vector dos deslocamentos correspondentes às forças hiperstáticas e

$$u = \{u_1, u_2,\ldots, u_B\} \qquad (8)$$

o vector das *deformações independentes* correspondentes aos esforços (4).

Na hipótese das pequenas deformações e deslocamentos, o deslocamento v_i introduzido na estrutura hiperstática pela acção das deformações u, é definida por

$$v = \sum_{m=1}^{B} \widetilde{B}_m\ u_m \qquad (9)$$

em que $\widetilde{B}_m$ representa a transposta da matriz B_m.

Se se admitir que as peças estruturais têm um comportamento elástico-linear, as relações que caracterizam as deformações no elemento m podem ser expressas na forma

$$u_m = F'_m\ X_m + u_{om}\ ;\ m = 1,2,\ldots, B \qquad (10)$$

em que F'_m representa a *matriz de flexibilidade* do elemento e u_{om} o vector que lista as deformações causadas pela solicitação de vão.

Agrupando (6), (9) e (10) de acordo com as definições (4), (5), (7) e (8) encontram-se as seguintes expressões para as condições de equilíbrio, compatibilidade e elasticidade da estrutura isostática

$$X = B\ p + X_o\ ,\ v = \widetilde{B}\ u\ ,\ u = F'\ X + u_o \qquad (11\text{-}13)$$

em que $\quad F' = [F'_m]\ ,\ m = 1\ ,2\ ,\ldots,\ B$

é uma matriz diagonal por blocos e

$$B = [B_m]\ ,\ m = 1\ ,2\ ,\ldots,\ B$$

Para tornar as condições (11-13) válidas para a estrutura hiperstática a analisar, basta impor que sejam nulos os deslocamentos relativos onde se introduziram as α libertações para obter a estrutura isostática:

$$v = 0 \qquad (14)$$

A equação (2) do método das forças, em que

$$F = \widetilde{B}\ F'\ B\ ,\ v_o = \widetilde{B}\ (F'\ X_o + u_o) \qquad (15, 16)$$

é obtida substituindo as relações de elasticidade (13) na condição de compatibilidade (12, 14) e eliminando os esforços na equação resultante através da condição de equilíbrio (11).

Em consequência da matriz de flexibilidade das barras ser diagonal por blocos, os definições (15, 16) podem ser escritas na forma

$$F = \sum_{m=1}^{B} F_m\ ,\ v_o = \sum_{m=1}^{B} v_{om} \qquad (17, 18)$$

em que $\quad F_m = \widetilde{B}_m\ F'_m\ B_m \qquad (19)$

e $\quad v_{om} = \widetilde{B}_m\ u'_{om} \qquad (20)$

com $\quad u'_{om} = F'_m\ X_{om} + u_{om} \qquad (21)$

DEFINIÇÃO DOS OPERADORES DE CAUSALIDADE ELÁSTICA

Como se ilustra na figura 5, os esforços escolhidos para caracterizar o estado de tensão no elemento m

$$X_m = \{M_1\ , M_2\ , N\}_m \qquad (22)$$

são os momentos flectores nas secções extremas e o esforço axial na extremidade da direita, para a orientação aí indicada.

Analogamente, o vector das deformações generalizadas

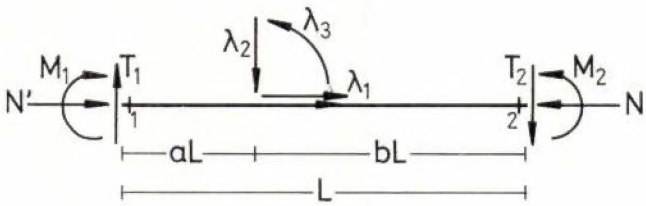
$$u_m = \{\Theta_1\ , \Theta_2\ , \varepsilon\}_m \qquad (23)$$

agrupa as rotações das secções extremas, medidas em relação à corda do elemento, e o encurtamento axial por ele sofrido, como se indica na figura 6.

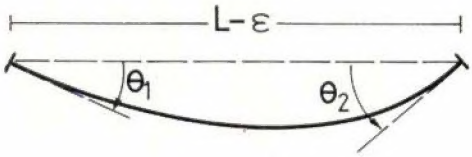
Se se admitir que a barra m é homogénea, de eixo recto e de secção constante, com momento de inércia I_m e área A_m, encontra-se a seguinte expressão para a matriz de flexibilidade

$$F'_m = \begin{bmatrix} L/3EI & L/6EI & 0 \\ & L/3EI & 0 \\ \text{simétrica} & & L/EA \end{bmatrix}_m \qquad (24)$$

que define as deformações generalizadas (23) causadas pelos esforços correspondentes (22); na definição (24) L_m representa o comprimento inicial da peça e E_m o seu módulo de elasticidade.



(Fig. 5)



(Fig. 6)

As deformações adicionais são definidas por

$$u_{om} = \left(\frac{L^2}{6EI}\right)_m \times$$

$$\times \begin{bmatrix} \cdot & a\,b\,(1+b) & (1-3b^2)/L \\ \cdot & a\,b\,(1+a) & -(1-3a^2)/L \\ -6aI/AL & \cdot & \cdot \end{bmatrix}_m \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{bmatrix}_m \qquad (25)$$

para as forças concentradas apresentadas na figura 5.

Outras acções de vão, nomeadamente forças distribuídas, variações de temperatura e pré-esforço, são consideradas em [2], podendo encontrar-se na mesma referência a generalização das definições (24) e (25) para peças de secção variável.

DEFINIÇÃO DOS OPERADORES DE EQUILÍBRIO

Na condição de equilíbrio (11), X_o representa uma *qualquer* distribuição de esforços que equilibra o carregamento, globalmente ou cada uma das acções tomadas separadamente [3].

Analogamente, as colunas da matriz B representam as distribuições de esforços que equilibram as forças hiperstáticas correspondentes; por definição são α distribuições de esforços auto-equilibradas e linearmente independentes [4].

É em consequência destas propriedades que se podem estabelecer as expressões gerais para os operadores de equilíbrio que a seguir se apresentam.

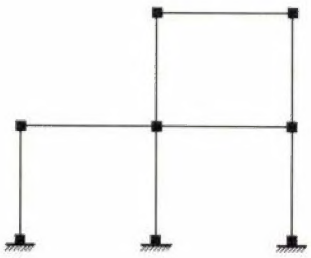
Acção das Forças Hiperstáticas

Como se ilustra nas figs. 7 e 8, um pórtico rectangular pode ser considerado como tendo sido construído ligando entre si

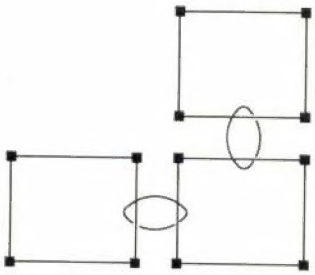
$$C = B - N \qquad (26)$$

quadros rectangulares; o grau de indeterminação estática da estrutura é portanto

$$\alpha = 3\,C \qquad (27)$$



(Fig. 7)



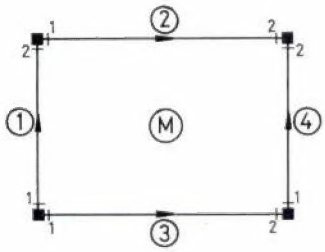
(Fig. 8)

Considere-se o quadro genérico M representado na figura 9, onde se indica a numeração utilizada para identificar as barras que a constituem, assim como a orientação adoptada.

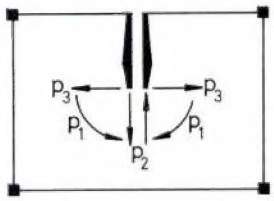
Para tornar o quadro isostático introduz-se um corte, escolhendo-se para forças hiperstáticas

$$P_M = \{p_1, p_2, p_3\}_M \qquad (28)$$

um sistema ortogonal actuando no centro geométrico do quadro, ligado ao corte introduzido por meio de bielas rígidas, como se ilustra na figura 10.



(Fig. 9)



(Fig. 10)

As forças hiperstáticas provocam uma distribuição de esforços na barra i definida por

$$X_{im} = B_{im}\ p_M\ ,\ i = 1,\ 2,\ 3,\ 4 \qquad (29)$$

em que

$$B_{1m} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ . & 2/L_2 & . \end{bmatrix}_m \quad B_{2m} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ . & . & 2/L_1 \end{bmatrix}_m$$

$$B_{3m} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ . & . & -2/L_1 \end{bmatrix}_m \quad B_{4m} = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ . & -2/L_2 & . \end{bmatrix}_m \qquad (30)$$

se se fizer $p_1 = 1$, $p_2 = 2/L_2$ e $P_3 = 2/L_1$; nas definições acima L_m representa o vão da barra m.

Acção do Carregamento

O processo mais simples para equilibrar forças aplicadas a um nó da estrutura consiste em descarregá-las na consola que se obtém desligando do resto da estrutura o montante que termina nesse nó, como se ilustra na figura 11.

Os esforços no pilar m desse montante são definidos por

$$X_{om} = B_{omn}\ \lambda_n \qquad (31)$$

com

$$B_{omn} = \begin{bmatrix} y'_i & 0 & +1 \\ y'_j & 0 & +1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad (32a)$$

em que $\quad y'_k = y_k - y_n\ ;\ k = i\ ,\ j$

devendo notar-se que

$$B_{omn} = 0 \qquad (32b)$$

se y'_j for positivo.

As forças aplicadas nas barras da estrutura são equilibradas transformando numa consola a malha a que essas barras pertencem, como se ilustra na figura 12.

Os esforços nas barras que pertencem à malha são definidos por

$$X_{01M} = \{l'\ \lambda'_3 - h'\ \lambda'_1 - h\ \lambda'_4\ ;\ -l'\ \lambda'_3\ ;\ \lambda'_3\}_M \qquad (33a)$$

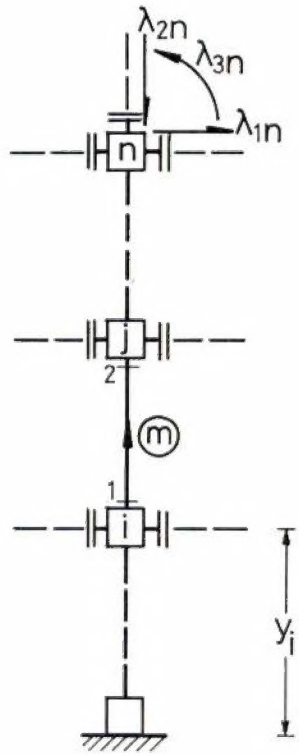
$$X_{02M} = \{-l'\ \lambda'_3\ ;\ 0\ ,\ 0\}_M \qquad (33b)$$

$$X_{03M} = X_{04M} = 0 \qquad (33c,d)$$

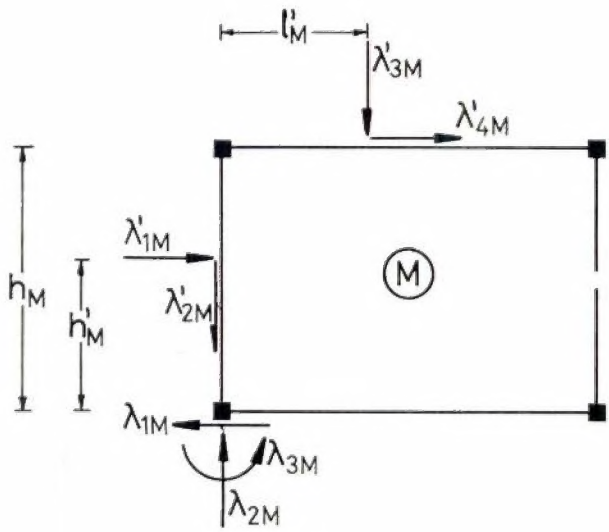
se se adoptar a numeração e a orientação indicada na figura 9.

As reacções de apoio são definidas por

$$\lambda_M = \{\lambda'_1 + \lambda'_4\ ;\ \lambda'_2 + \lambda'_3\ ;\ h'\ \lambda'_1 + l'\ \lambda'_3 + h\ \lambda'_4\}$$



(Fig. 11)



(Fig. 12)

e introduzem esforços definidos por (31) nos pilares pertencentes a esse montante.

Nas definições acima, λ'_k pode representar a resultante de uma força distribuída.

DESCRIÇÃO GERAL DO ALGORITMO

Tendo definido as expressões gerais dos operadores intervenientes na análise de pórticos rectangulares pelo método das forças, interessa descrever sumariamente as principais fases do algoritmo de solução a adoptar na preparação de um programa de cálculo automático |5|.

Caracterização da Estrutura

A regularidade da geometria dos pórticos rectangulares permite minimizar a intervenção do utilizador no programa de cálculo automático.

Como dados o utilizador tem de fornecer ao programa o número de vãos, o número de pisos por vão, a largura de cada vão e a altura de cada piso. Com base nesta informação, podem construir-se rotinas que numeram automaticamente os nós, os quadros e as barras da estrutura e que definem para cada barra os nós que a limitam e os quadros a que pertence. A numeração dos quadros deve ser escolhida de modo a garantir o bandeamento da matriz de flexibilidade.

Para caracterizar as propriedades mecânicas da estrutura, o utilizador tem ainda de fornecer a área, o momento de inércia e o módulo de elasticidade para cada grupo de barras que partilhem as mesmas características.

Caracterização do Carregamento

O último grupo de dados que o utilizador tem de fornecer é o que caracteriza a solicitação, indicando o tipo, a localização, a intensidade e o sentido.

Definidas as forças nodais determinam-se as entradas correspondentes do vector dos esforços iniciais, X_o, recorrendo à definição (31).

Com base na informação sobre a solicitação de vão, calcula-se a sua contribuição para os esforços iniciais recorrendo a (33) e (31) e as deformações iniciais que provoca utilizando a definição (25).

Montagem do Sistema Resolutivo

Seja $\quad B_m = [B_{mn}]\ ,\ n = 1,2,\ldots,\ \alpha$

a expressão geral da matriz de equilíbrio presente nas definições (19) e (20).

Como uma barra pertence no máximo a dois quadros, pelo menos $\alpha - 2$ e no máximo $\alpha - 1$ das submatrizes B_{mn} são nulas; o bandeamento da matriz de flexibilidade (17) é uma consequência desta propriedade.

O termo genérico da matriz de flexibilidade toma expressão

$$F_{ij} = \sum_{m \varepsilon i,j} \widetilde{B}_{mi}\ F_m\ B_{mj} \qquad (34)$$

estendendo-se o somatório às barras m que pertencem simultaneamente aos quadros i e j, encontrando-se analogamente a seguinte definição para o termo genérico do vector dos deslocamentos nas libertações

$$v_i = \sum_{m \varepsilon i} \widetilde{B}_{mi}\ (F'_m\ X_{om} + u_{om}) \qquad (35)$$

Nas expressões (34) e (35) os operadores de equilíbrio e de elasticidade associados à barra m são definidos por (30) e (24), respectivamente.

Depois de montado o sistema resolutivo (2), levanta-se a hiperstaticidade da estrutura recorrendo a rotinas que explorem a simetria e o bandeamento da matriz de flexibilidade.

ESTRUTURAS COM APARELHOS DE LIBERTAÇÃO

A formulação anteriormente apresentada foi desenvolvida supondo que a estrutura a analisar era constituída por barras que se ligavam rigidamente entre si e ao meio de fundação. Indicam-se em seguida as alterações que se devem introduzir nessa formulação quando algumas dessas ligações se realizam por meio de aparelhos de libertação como os representados na figura 13.

Libertações Elásticas

Seja $\quad X' = \{X'_m\} \quad m = 1,2,\ldots,\ B'$

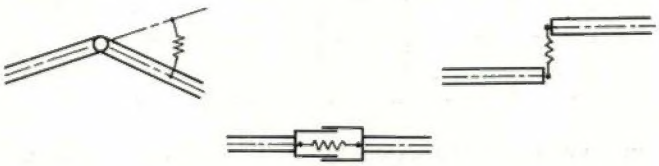
o vector que agrupa as forças que se desenvolvem nos B' aparelhos de libertação e

$$u' = \{u'_m\} \quad m = 1,2,\ldots,\ B'$$

com $\quad u'_m = F''_m\ x'_m \qquad (36)$

o vector dos deslocamentos correspondentes;

$$F'' = [F''_m] \quad m = 1,2,\ldots,\ B'$$



(Fig. 13)

é a matriz diagonal que agrupa as constantes elásticas das molas.

Conhecendo o tipo e a localização dos aparelhos de libertação é fácil exprimir as forças nas molas em função dos esforços independentes das barras em que esses aparelhos se situam; a condição de equilíbrio

$$X'_m = B'_m\, p + X'_{om} \qquad (37)$$

pode portanto ser obtida por particularização da definição (6) para os esforços independentes.

Atendendo a que a condição de compatibilidade (9) toma agora a forma

$$v = \sum_{m=1}^{B} \tilde{B}_m\, u_m + \sum_{m=1}^{B'} \tilde{B}'_m\, u'_m \qquad (38)$$

encontra-se a seguinte generalização

$$F = \tilde{B}\, F'\, B + \tilde{B}'\, F''\, B' \qquad (39a)$$

$$v_o = B\,(F'\, X_o + u_o) + B'\, F''\, X'_o \qquad (39b)$$

para as definições (15, 16) dos operadores presentes na equação do método das forças. Os termos adicionais podem ser obtidos usando as técnicas anteriormente referidas, pois os operadores intervenientes mantém as mesmas propriedades.

Libertações Perfeitas

Para as B″ libertações livres que existam na estrutura podem ser estabelecidas equações de equilíbrio do tipo da das libertações elásticas,

$$X''_m = 0 = B''_m\, p + X''_{om} \quad m = 1,2,\ldots, B'' \qquad (40)$$

devendo agora impor-se que estas forças sejam nulas em substituição das relações de elasticidade (36).

Como a condição de compatibilidade (38) se generaliza agora para

$$v = \sum_{m=1}^{B} B_m u_m + \sum_{m=1}^{B'} \tilde{B}'\, u'_m + \sum_{m=1}^{B''} \tilde{B}''_m\, u''_m$$

encontra-se a seguinte expressão para o sistema do método das forças

$$\left[\begin{array}{c|c} F & \tilde{B}'' \\ \hline B'' & \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} p \\ \hline u'' \end{array}\right] + \left[\begin{array}{c} v_o \\ \hline X''_o \end{array}\right] = 0 \qquad (41b)$$

em que a segunda equação representa a condição de equilíbrio (40). As definições (39) são ainda válidas para a equação da compatibilidade (41a).

Como o sistema (41) mostra, o grau de hiperstaticidade da estrutura passa a tomar o valor

$$\alpha' = \alpha - B''$$

como aliás seria de esperar.

O método acima descrito deve ser abandonado quando o número de libertações perfeitas se torna significativo relativamente ao grau de hiperstaticidade da estrutura na ausência dessas libertações. Nestes casos está-se a resolver uma estrutura de hiperstaticidade $\alpha' \ll \alpha$ utilizando um sistema resolutivo de dimensão $\alpha + B'' \gg \alpha$.

Um método alternativo consiste em modificar directamente a matriz de flexibilidade das barras para se passar a contemplar o efeito das libertações.

Seja $$X_M = B_M\, p_M + X_{oM} \qquad (42)$$

a equação de equilíbrio dos quadros que partilham a barra onde existem libertações perfeitas; o sistema (42) é obtido agrupando as condições (6) para os quadros em questão.

A equação (42) pode ser expressa na forma equivalente

$$\left[\begin{array}{c} X \\ \hline X'' = 0 \end{array}\right]_M = \left[\begin{array}{c|c} B_1 & B_2 \\ \hline b_1 & b_2 \end{array}\right]_M \left[\begin{array}{c} p' \\ \hline p'' \end{array}\right]_M + \left[\begin{array}{c} X_o \\ \hline X''_o \end{array}\right]_M \begin{array}{l} (43a) \\ (43b) \end{array}$$

em que se explicitaram os esforços que devem ser nulos. O subvector p''_M é escolhido de modo a garantir que a submatriz b_{2M} seja não-singular.

Resolvendo a equação (43b), encontra-se a definição alternativa

$$X_M = B'_M\, p'_M + X'_{oM}$$

para a condição de equilíbrio (42), em que

$$B'_M = (B_1 - B_2\, b_2^{-1}\, b_1)_M$$

e $$X'_{oM} = (X_o - B_2 b_2^{-1}\, X''_o)_M\,.$$

RESOLUÇÃO DA ESTRUTURA

Levantada a hiperstaticidade da estrutura, os esforços independentes e as forças nas libertações elásticas são calculadas a partir das condições de equilíbrio (6) e (37), respectivamente; de entre as forças hiperstáticas, só contribuem as correspondes aos quadros que partilham a barra em questão.

Os esforços dependentes podem depois ser calculados a partir das seguintes definições

$$N' = N - \lambda_1 \ , \ T_1 = T_2 + \lambda_2$$

$$T_2 = (-M_1 + M_2 - a\,L\,\lambda_2 + \lambda_3)/L$$

de acordo com a notação indicada na figura 5.

De acordo com a condição de equilíbrio (31), os deslocamentos correspondentes às forças nodais representadas na figura 11, são definidas por

$$\delta_n = \sum_{m \varepsilon P_n} \left[\widetilde{B}_{o_{mn}} u_m + \widetilde{B}'_{o_{mn}} u'_m + B''_{o_{mn}} u''_m \right]$$

devendo o somatório abranger apenas os pilares P_n que ligam o nó n à fundação. As deformações independentes, u, e os deslocamentos nas libertações elásticas, u', são calculadas a partir das relações constitutivas (10) e (36), r espectivamente, sendo os deslocamentos nas libertações perfeitas fornecidos pela solução do sistema (41).

CONCLUSÃO

Tal como sucede na equação do método dos deslocamentos, a matriz do sistema do método das forças é simétrica e bandeada. Em qualquer dos casos a montagem automática dessa matriz é facilmente realizável, apresentando o método das forças a vantagem de produzir sistemas cuja solução envolve um menor volume de operações numéricas.

A viabilidade de implementar o método das forças em computador depende essencialmente da possibilidade de gerar automaticamente uma distribuição de esforços que equilibre a solicitação. Para o caso particular dos pórticos rectangulares esta operação pode ser facilmente executada explorando a regularidade da topografia da estrutura.

A existência de libertações perfeitas complica tanto a montagem como a solução do sistema resolutivo, qualquer que seja o método de análise. Tal como no método dos deslocamentos, também no método das forças se pode recorrer a uma de duas técnicas alternativas para processar o efeito das libertações perfeitas; aceitar os deslocamentos nessas libertações como variáveis do sistema ,ou alterar directamente as condições de equilíbrio e de compatibilidade das barras afectadas por essas libertações. A primeira destas técnicas tem a vantagem de exigir um esforço mínimo de programação adicional.

REFERÊNCIAS

[1] JENNINGS, A., Matrix Cmputation for Engineers and Scientists, John Wiley & Sons, 1977.

[2] FREITAS, J. A. T. e J. P. M. ALMEIDA, Análise de Pórticos de Vãos Múltiplos em Microcomputador, Jorn. Port. Engenharia de Estruturas, 1982.

[3] ARGYRIS, J. H. e S. KELSEY, Energy Theorems and Structural Analysis, Butterworth, 1960.

[4] JENKINS, R. S., Linear Analysis of Statically Indeterminate Structures, Euler Society, 1, 1954.

[5] FREITAS, J. A. T. e E. M. B. R., PEREIRA, METFOR: Programa para Análise Elástica de Pórticos Regulares pelo Método das Forças Generalizado, CTE 40, CMEST, 1983.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO GOLPE DE ARÍETE EM SISTEMAS ELEVATÓRIOS COM CONDUTAS DE ASPIRAÇÃO LONGAS

A. BETÂMIO DE ALMEIDA*
P. FALCÃO E CUNHA**

RESUMO

Em alguns casos de sistemas elevatórios a conduta de aspiração tem um comprimento significativo e os efeitos do golpe de aríete podem ser alterados de forma apreciável relativamente aos casos usuais de sistemas com grupos electrobomba colocados junto ao reservatório de montante.

No presente artigo faz-se a síntese dos principais resultados obtidos com a exploração sistemática de um modelo matemático desenvolvido para o efeito, apresentando-se algumas conclusões respeitantes a cotas piezométricas extremas e respectivas envolventes, ao tempo de anulação de caudal nos grupos e à velocidade residual de rotação daqueles. Estas conclusões são apresentadas de forma adimensional com vista à sua utilização prática e à generalização da sua aplicabilidade.

ABSTRACT

In some pumping systems the suction line is significantly long and the water hammer effects can be changed in some extent in relation to the usual situations where the pumps are placed near the upstream reservoir.

In this article a synthesis is made of the main results obtained with the systematic operation of a mathematical model develloped to cope with such situations. The authors present the conclusions concerning extreme pressure heads and respective envelope lines, time of flow stoppage in the pumps and residual pump speed.

These conclusions are presented in an adimensional way aiming its practical application and the generalization of its field of utilization.

PARTE I — Modelação Matemática

1. INTRODUÇÃO

Nos casos usuais de sistemas elevatórios, os grupos electrobomba estão colocados junto ao reservatório de montante sendo o comprimento das respectivas condutas de aspiração, para efeitos de análise do golpe de aríete, desprezável em comparação com o comprimento da conduta elevatória a jusante dos grupos. Para esta situação existem já numerosos elementos de consulta que possibilitam a determinação aproximada das cotas piezométricas extremas que ocorrem após a saída de serviço simultânea dos grupos electrobomba nos casos de condutas únicas e uniformes, sem dispositivos especiais de protecção contra o golpe de aríete e contando-se unicamente com a inércia dos grupos e de eventuais massas adicionais acopladas (volantes de inércia). Referências a estes elementos podem ser encontrados em ALMEIDA, 1981 e 1982.

Em alguns casos, contudo, a conduta de aspiração tem um comprimento significativo e os efeitos do golpe de aríete podem ser alterados de forma apreciável. Este facto pode eventualmente motivar o projectista a considerar diferentes localizações da central elevatória ao longo da conduta, tendo em conta as características topográficas e outros condicionalismos, por forma a conseguir atenuar as variações extremas de pressão no sistema e obter uma solução globalmente mais económica.

Na parte I do artigo apresentam-se os aspectos principais da modelação matemática e do programa de cálculo automático (denominado RESBOM) desenvolvido, bem como uma breve análise qualitativa do fenómeno. Na parte II do artigo apresenta-se uma síntese dos resultados obtidos com a exploração do programa RESBOM para simulações de regimes transitórios decorrentes da saída de serviço de grupos electrobomba colocados, em paralelo, em diversas secções ao longo de uma conduta elevatória uniforme. Procede-se, também, a uma análise geral do problema baseada em parâmetros adimensionais cuja dedução se apresenta na parte II. Os resultados obtidos incluem as envolventes das cotas piezométricas extremas, o tempo de anulação do caudal nos grupos a velocidade de rotação dos grupos no instante em que se dá a anulação do caudal. Uma breve análise de sensibilidade, relativa à variação do passo de cálculo Δt e à perda de carga hidráulica, é também apresentada na parte II do artigo.

É de referir ser escassa a informação bibliográfica acerca deste assunto, sendo de salientar como de maior interesse prático uma comunicação de Lev Pavluch (PAVLUCH, 1970).

* *Eng. Civil, Prof. Auxiliar do IST, Membro do CEHIDRO.*
** *Eng. Civil, Ex. Assistente do IST, Membro do CEHIDRO.*
Original recebido para publicação em 19/6/84.

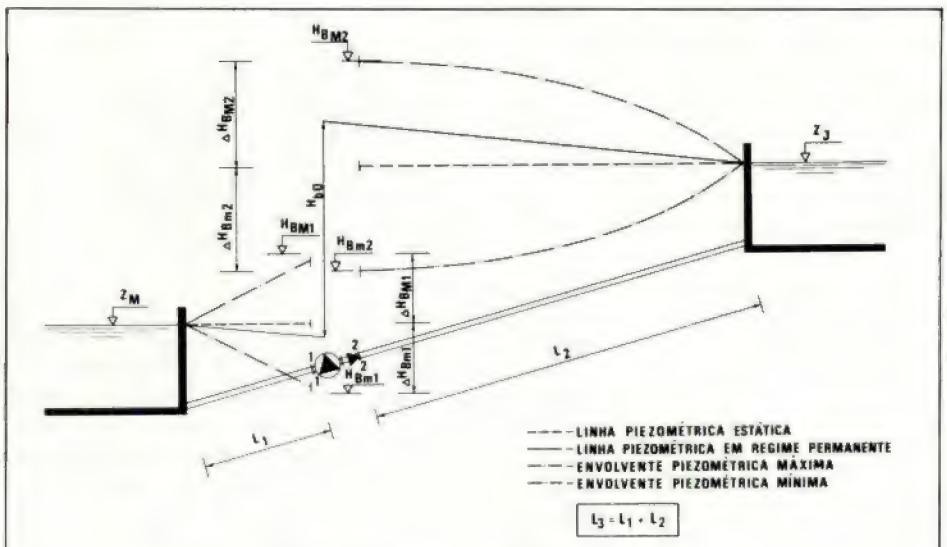


FIGURA 1 — ESQUEMA GERAL DE UM SISTEMA ELEVATÓRIO

2. ANÁLISE QUALITATIVA

Após a saída de serviço simultânea dos grupos electrobomba (situação clássica para análise do golpe de aríete), desencadeia-se um regime transitório que difere daquele que ocorreria se os mesmos grupos estivessem colocados junto do reservatório de montante (Figura 1). De modo qualitativo, as características principais deste regime são as seguintes:

— no trecho da conduta a montante dos grupos (conduta de aspiração) a linha piezométrica começará por subir, em consequência da diminuição do caudal na respectiva extremidade de jusante (bombas);

— no trecho de conduta a jusante dos grupos a linha piezométrica começará por baixar, em consequência da diminuição do caudal na respectiva extremidade de montante (bombas), tendendo as variações extremas de pressão neste trecho a serem inferiores às que ocorreriam no caso de a conduta de aspiração ter um comprimento nulo;

— a variação das cotas piezométricas instantâneas nas secções de entrada e de saída das bombas poderá provocar a passagem do escoamento através destas e alterar o instante de anulação do caudal ou de fechamento das válvulas de retenção.

Após o fechamento das válvulas de retenção colocadas a jusante dos grupos, os regimes transitórios nos dois trechos da conduta elevatória ficam desacopolados, oscilando as linhas piezométricas respectivas em torno da posição de equilíbrio final. Na figura 2 exemplifica-se a variação das cotas piezométricas nos primeiros instantes após a saída de serviço dos grupos.

3. HIPÓTESES E EQUAÇÕES BÁSICAS

3.1 — Hipóteses básicas

Na elaboração do programa RESBOM admitiram-se as seguintes hipóteses:

— conduta elevatória única e uniforme (diâmetro, espessura, material e celeridade constantes ao longo de todo o comprimento);

— saída de serviço simultânea dos grupos electrobomba podendo os mesmos ser substituídos por um grupo equivalente;

— ausência de dispositivos especiais de protecção à excepção das válvulas de retenção colocadas imediatamente a jusante dos grupos e de eventuais volantes de inércia acoplados a estes.

— fechamento instantâneo das válvulas de retenção nos instante da anulação do caudal nas bombas, admitindo-se que as mesmas não reabrem.

Na dedução das equações básicas do modelo matemático admitiram-se ainda as seguintes hipóteses:

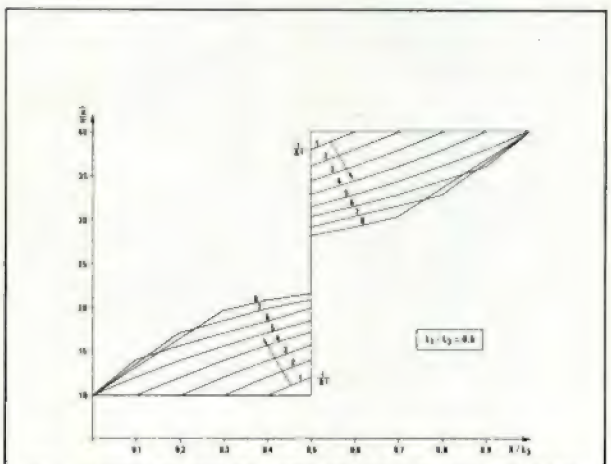


FIGURA 2 — SISTEMA ELEVATÓRIO COM A BOMBA NUMA SECÇÃO INTERMÉDIA. EVOLUÇÃO DA LINHA PIEZOMÉTRICA APÓS SAÍDA DE SERVIÇO DOS GRUPOS (sem perda de carga)

— escoamento puramente turbulento e unidimensional nas condutas, sendo desprezáveis a altura cinética e as perdas de carga localizadas e admitindo-se, em cada secção da conduta, a distribuição uniforme das velocidades;

— validade, durante os regimes transitórios, das curvas características e das fórmulas das perdas de carga contínuas utilizadas em regime permanente (hipótese quasi-estacionária);

— comportamento reológico elástico e linear do líquido (água) e da conduta, não sendo considerados os eventuais efeitos de cavitação ou de rotura da coluna líquida.

3.2 — Equações básicas

As equações básicas, válidas na modelação dos transitórios hidráulicos ao longo da conduta, são as seguintes (CHAUDHRY, 1979; WYLIE e STREETER, 1978):

— Equação do Balanço da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + gS \frac{\partial H}{\partial x} + RQ\,|Q| = 0 \qquad (1)$$

— Equação da Continuidade

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{c^2}{gS} \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \qquad (2)$$

em que Q = caudal, H = cota piezométrica, S = área da secção transversal da conduta, R = coeficiente de perda de carga unitária, c = celeridade das ondas elásticas, g = aceleração da gravidade, x = distância ao longo do eixo da conduta e t = tempo.

Na resolução numérica do sistema de equações (1) e (2) utiliza-se o método das características, na modalidade de malha computacional prefixada com Δ t constante, em conjunto com o método explícito de diferenças finitas. Da aplicação deste método misto resultam as seguintes duas famílias de equações (ALMEIDA, 1981):

— Equações C^+

$$(H_P - H_E) + \frac{c}{gS}(Q_P - Q_E) + RQ_E\,|Q_E|\,(x_P - x_E) = 0 \qquad (3)$$

$$x_P - x_E = +\,c\,\Delta t \qquad (4)$$

— Equações C^-

$$(H_P - H_D) - \frac{c}{gS}(Q_P - Q_D) + RQ_D\,|Q_D|\,(x_P - x_D) = 0 \qquad (5)$$

$$x_P - x_D = -\,c\,\Delta t \qquad (6)$$

em que os índices indicam os pontos da malha computacional no plano (x.t) a que dizem respeito os valores (Figura 3). No caso de $\Delta x = c\,\Delta t$, os pontos E e D coincidem com os nós A e B da malha prefixada, respectivamente à esquerda e à direita do ponto de cálculo P e no instante de cálculo anterior $t - \Delta t$. No caso de ser escolhido um passo de cálculo temporal tal que $\Delta x > c\,\Delta t$, os valores de Q e de H correspondentes aos pontos E e D são obtidos por interpolação linear a partir dos valores nos nós A, B e C (Figura 3). A execução de interpolações lineares dá origem a um amortecimento de tipo numérico cujo efeito há que limitar e deve estar presente na escolha dos valores de Δ x e de Δ t. A resolução das equações (3) e (5) permite obter de forma explícita os valores de Q_P e de H_P nas secções internas das condutas e em cada instante de cálculo.

3.3 — Modelação dos grupos electrobomba

A obtenção de soluções numéricas do sistema de equações básicas exige a caracterização matemática das condições de fronteira e o conhecimento das condições iniciais.

No caso em análise houve que considerar dois tipos de condições de fronteira (Figura 3): grupo electrobomba equivalente (na extremidade de montante ou numa secção intermédia da conduta elevatória) e reservatórios de grandes dimensões (nas extremidades de montante e de jusante da conduta elevatória).

Em regime permanente, a caracterização do grupo electrobomba equivalente a n bombas iguais e colocadas em paralelo é feita unicamente com a equação da curva característica das bombas a qual se admite ser, no programa RESBOM, do seguinte tipo:

$$H_b = AN^2 + BNQ_b / n - CQ_b{}^2 / n^2 \qquad (7)$$

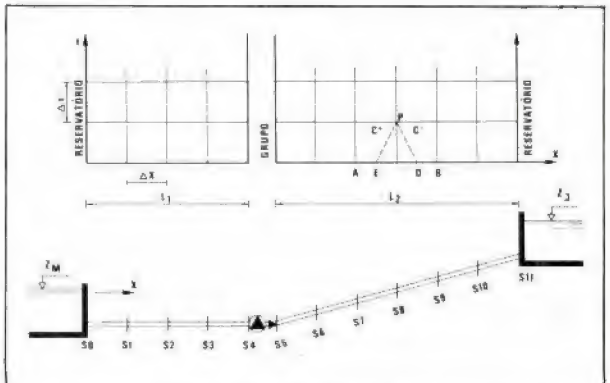


FIGURA 3 — MODELAÇÃO MATEMÁTICA (método das características) DISCRETIZAÇÃO E CONDIÇÕES DE FRONTEIRA

em que H_b = altura de elevação nas bombas (diferença entre as cotas piezométricas imediatamente a montante e a jusante das bombas), Q_b = caudal no grupo equivalente, N = velocidade do grupo equivalente (em r.p.m.), A, B, C = coeficientes da curva característica de cada bomba fornecida pelo fabricante. A equação pode ser adaptada de modo a caracterizar bombas colocadas em paralelo mas diferentes entre si ou bombas colocadas imediatamente em série (FOX, 1977).

Desligados os motores eléctricos e iniciado o regime transitório, o valor de N diminuirá. No programa RESBOM, a determinação do valor de N em cada instante de cálculo é feita de dois modos diferentes:

— No intervalo de tempo T_E (tempo de reflexão elástica total do sistema) após a saída de serviço dos grupos electrobomba segue-se um modelo conceptual de tipo exponencial baseado numa solução exacta aproximada (ALMEIDA, 1981).

— Para tempos de simulação do regime transitório superiores a T_E procede-se à integração numérica da equação das massas girantes de acordo com uma técnica de previsão-correcção.

As equações utilizadas na modelação matemática são as seguintes:

— Para $\Delta T \leq T_E$

$$N_t = N_{t-\Delta t} \; [1 + (e^{-\beta \Delta t} - 1) / \bar{p}] \qquad (8)$$

com $\beta = 1 / (\eta_o \lambda T_E)$

— Para $\Delta T > T_E$

$$N_t = N_{t-\Delta t} - 0{,}5 \, Kg \, (M_t + M_{t-\Delta t}) \, \Delta t \qquad (9)$$

com $Kg = 3600 \, g / (\Pi^2 \; PD^2)$

sendo Δt = intervalo de tempo após o início do regime transitório, T_E = tempo de reflexão total ($T_E = 2L_3 / c$), N_t, $N_{t-\Delta t}$ = valores de N nos instantes de cálculo t e t $-\Delta t$, η_o = rendimento do grupo electrobomba, $\bar{p}$ = parâmetro característico de conduta (ver Anexo 1), λ = coeficiente de compensação energética (ver Anexo 1), PD^2 = parâmetro característico da inércia das massas girantes e M_t, $M_{t-\Delta t}$ = binário actuante no grupo electrobomba calculado do seguinte modo, sendo γ = peso volúmico da água estando incluída em Kg a conversão numérica de unidades:

$$M = \gamma \, Q_b \, H_b / (\eta_o \, N) \qquad (10)$$

Na fase de exploração do programa a que o presente estudo diz respeito, admitiu-se que os coeficientes A, B e C da curva característica da bomba permanecem constantes durante o regime transitório e que a utilização das equações (9) e (10) é válida até ao instante de fechamento da válvula de retenção do grupo electrobomba. Não é assim feita a distinção entre as diferentes fases de funcionamento possíveis da bomba: fase de funcionamento normal, fase de dissipação e fase de turbinagem. São impostas, contudo, duas condições adicionais correspondentes às duas últimas fases:

— a velocidade de rotação não pode ser negativa (valor mínimo = 1 r.p.m.);

— em cada instante de cálculo, a velocidade de rotação N_t não pode ser superior a $10 \, N_{t-\Delta t}$.

Uma caracterização mais correcta do comportamento das bombas hidráulicas exigiria o conhecimento das curvas características (alturas de elevação e binários) nas eventuais fases de funcionamento em turbinagem e em dissipação o que é, em geral, muito difícil de obter junto dos fornecedores.

Da conjugação das equações do método das características (equações (3) e (5)) com as equações (7) e (8) ou (9) obtém-se a seguinte expressão para o caudal instantâneo na bomba equivalente:

$$Q_b = (y + \sqrt{y^2 - 4 \, x \, C^*}) / 2 / C^* \qquad (11)$$

sendo:

$$\begin{aligned} y &= BN_t / n - \alpha \, c / (g \, S) \\ x &= C1 - C2 - AN_t^2 \\ C^* &= C / n^2 \end{aligned} \qquad (12)$$

em que (Figura 1), no caso de bombas de extremidade ($L_1 = 0$), $\alpha = 1$ e $C1 = Z_M$ e no caso de bombas com conduta de aspiração longa ($L_1 \neq 0$), $\alpha = 2$ e

$$C1 = H_E + (\frac{c}{gS} - R \, |Q_E|) . \, Q_E \qquad (13)$$

sendo, em ambos os casos,

$$C2 = H_D - (\frac{c}{gS} - R \, |Q_D|) . \, Q_D \qquad (14)$$

Com base na expressão (11) o programa detecta automaticamente a tendência de inversão de sentido do caudal Q_b e simula o fechamento da válvula de retenção ($Q_b = 0$).

Determinado o valor de Q_b em cada instante de cálculo, os valores das cotas piezométricas imediatamente a montante e a jusante do grupo electrobomba equivalente são obtidos a partir das equações (3) e (5).

3.4 — Reservatórios de extremidade

Admite-se, no presente estudo, a existência de reservatórios de grandes dimensões (Figura 3) nos quais a cota piezométrica coincide com a cota da respectiva superfície livre. Nos casos em que a conduta de aspiração tem um comprimento não nulo ($L_1 \neq 0$), a condição de fronteira na

secção inicial da conduta (extremidade de montante) é modelada substituindo H_p, na equação (5), por Z_M é obtendo-se assim directamente a partir desta equação o correspondente valor de Q_P. No caso de a conduta de aspiração ter comprimento nulo ($L_1 = 0$) a modelação do reservatório de montante está implícita na modelação dos grupos electrobomba (expressões (11) e (12)).

Na extremidade de jusante, a condição de fronteira é modelada de modo análogo substituindo H_P, na equação (3), por Z_J o que permite o cálculo directo de Q_P.

4. PASSO DE CÁLCULO TEMPORAL

Com base nos valores fornecidos de L_1, L_2 e do número de trechos de cálculo NT, o programa RESBOM determina automaticamente o valor do intervalo de tempo Δt^* compatível com a condição de estabilidade numérica:

$$\Delta t^* = \left(\frac{L_1 + L_2}{NT}\right) / c \qquad (15)$$

Para diminuir os erros na integração da equação das massas girantes (equação (9)), o programa calcula o passo de cálculo Δt^{**} definido por (ALMEIDA, 1981):

$$\Delta t^{**} = \bar{\rho}\ T_E\ \lambda / 2 \qquad (16)$$

e adopta para passo de cálculo temporal o menor dos dois valores de Δt. A expressão (16) corresponde à condição de a variação de velocidade do grupo electrobomba não ser superior, num esquema de integração explícito de 1.ª ordem, ao valor inicial de N.

O tempo total de cada simulação é automaticamente escolhido por forma a que a envolventes possam incluir os valores das cotas piezométricas máximas que ocorrem após o fechamento das válvulas de retenção. Admitindo que a simulação de regime transitório se inicia no instante $t = 0$, o instante final da simulação, T_F, é calculado a partir da seguintes expressão (ALMEIDA, 1981):

$$T_F\ (s) = \frac{3}{4}\ Tw\ (1 + \lambda) + 20 \qquad (17)$$

em que Tw = tempo de inércia rígida da coluna líquida ($Tw = 0{,}5\ \bar{\rho}\ T_E$)

5. EFEITOS DA TÉCNICA DE INTERPOLAÇÃO

A adopção de um passo de cálculo Δt inferior ao valor Δt^*, calculado pela expressão (15), exige a execução de interpolações lineares ao longo do eixo da conduta no cálculo de H_p e de O_p o que introduz alterações ou erros na simulação numérica que são do seguinte tipo (ALMEIDA, 1981):

— alteração nas amplitudes das flutuações de pressão (amortecimento numérico fictício);
— alteração na velocidade de propagação ou de fase.

A análise completa destes efeitos é muito difícil, em especial no caso de ocorrerem múltiplas reflexões das ondas elásticas e quando as perdas de carga hidráulica não são desprezáveis. Em casos muito simplificados é possível a aplicação da técnica de análise de Fourier, nos domínios do espaço e do tempo, conseguindo-se então obter os factores de atenuação e de propagação de ondas sinusoidais em função dos respectivos comprimentos de onda (WIGGERT e SUNDQUIST, 1977). Do ponto de vista prático, os efeitos motivados pela técnica de interpolação podem ser muito importantes pois podem conduzir a cotas piezométricas máximas calculadas inferiores às reais e a velocidades fictícias de propagação das perturbações, ao longo das condutas, superiores às reais.

Na simulação de regimes transitórios numa conduta elevatória, a importância destes efeitos é função dos dois parâmetros adimensionais seguintes (ALMEIDA, 1981):

$$Cr = \frac{c\ \Delta t}{\Delta x}\ (\text{Número de Courant}) \qquad (18)$$

e

$$NO = \frac{\Delta x}{L_3}\ (\text{Número de onda}) \qquad (19)$$

O número de Courant permite uma quantificação do afastamento dos pontos de cálculo E e D relativamente aos nós A e B da malha de cálculo (Figura 3) e o número de onda dá uma medida do grau de discretização relativamente ao comprimento de onda característico.

No caso do Cr ser igual à unidade não há interpolações e, por consequência, não ocorrem as alterações referidas. No caso de Cr ser inferior à unidade os efeitos em causa serão tanto mais significativos quanto maior for o valor de NO. Como regra geral, não são de aconselhar valores de Cr inferiores a 0,5 e valores de NO superiores a 0,1. Em valores absolutos, o amortecimento numérico vai também depender das características do sistema elevatório e das características das perturbações que ocorrem durante o regime transitório. A caracterização destes dois factores físicos será feita, na parte II do presente artigo, por parâmetros adimensionais.

6. SAÍDA DE RESULTADOS

O programa RESBOM fornece como saída ("output") os valores das seguintes grandezas:

— cota piezométrica, altura piezométrica e caudal, em cada secção de cálculo;
— velocidade de rotação do grupo electrobomba;
— envolventes das cotas piezométricas e das alturas piezométricas externas ao longo da conduta;
— instante de ocorrência do fechamento das válvulas de retenção;
— caudal nas bombas no último instante de cálculo ou de simulação (controlo de que o tempo total de simulação é suficiente);
— intervalo de tempo teórico de funcionamento de um eventual "by-pass" no grupo electrobomba;
— dados iniciais e parâmetros característicos (e.g. $\bar{\rho}$ e λ);

Quando o programa é utilizado num estudo sistemático, com variação dos valores dos parâmetros $\overline{\rho}$ e λ, é também impresso um quadro com as variações extremas relativas das cotas piezométricas com todas as secções de cálculo.

7. EXEMPLO DE UTILIZAÇÃO

Uma das razões que poderá justificar a colocação dos grupos electrobomba numa secção intermédia da conduta elevatória é tornar mais económica a protecção contra o golpe de aríete ou mesmo evitar a colocação de dispositivos especiais de protecção.

Na fase de análise preliminar, pode mostrar-se vantajoso estudar os efeitos, nas cotas piezométricas extremas, de diferentes localizações dos grupos electrobomba. A título de exemplo, considere-se um sistema elevatório com as seguintes características gerais (Figura 4):

Comprimento total	$L_3 = 2500$ m
Diâmetro da conduta	$D = 1{,}0$ m
Celeridade das ondas elásticas	$c = 800$ m/s
Caudal inicial em regime permanente	$Q_o = 1$ m^3/s
Altura de elevação topográfica	$Hg = 25{,}6$ m
Velocidade inicial dos grupos	$N_o = 1000$ r.p.m.
Rendimento dos grupos	$\eta_o = 0{,}80$

Coeficiente da curva característica do grupo electrobomba

$$A = 0{,}5037 \times 10^{-4} \text{ m (r.p.m.)}^{-2}$$
$$B = -0{,}1852 \times 10^{-2} \text{ m (r.p.m.)}^{-1} \text{ (m}^3\text{/s)}^{-1}$$
$$C = 0{,}1852 \times 10^{2} \text{ m (m}^3\text{/s)}^{-2}$$

Perda de carga total inicial	$\Delta H_o = 4{,}1$ m
Parâmetro característico da conduta	$\overline{\rho} = 3{,}4$
Coeficiente de compensação energética	$\lambda = 0{,}2$

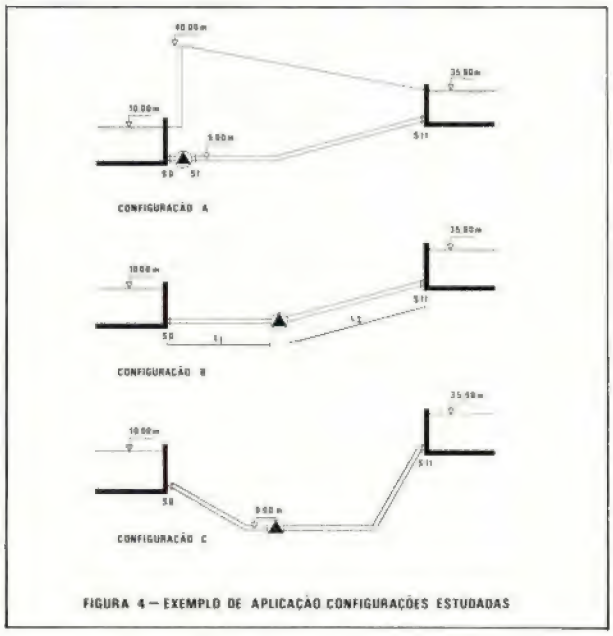


FIGURA 4 — EXEMPLO DE APLICAÇÃO CONFIGURAÇÕES ESTUDADAS

Consideram-se para comparação três configurações (Figura 4) consoante o perfil da conduta e a posição do grupo electrobomba equivalente: configuração A com $L_1 = 0$ e configuração B e C com $L_1 = 750$ m. As simulações foram efectuadas com $\Delta x = 250$ m e $\Delta t = 0{,}31$ s (Cr = 1 e NO = 0,10). No Quadro 7.1 indicam-se, para cada configuração e para cada secção de cálculo, os valores da cota do eixo (z) e das alturas piezométricas mínima (y_m) e máxima (y_M).

Os resultados obtidos permitem concluir que a configuração A corresponde à ocorrência de pressões subatmosféricas ao longo de toda a conduta com especial predominância nas secções mais afastadas do grupo electrobomba. Mantendo o perfil da conduta (perfil linearmente ascendente), a colocação do grupo a 750 m do reservatório (configuração B) agrava substancialmente os valores das pressões mínimas na conduta de aspiração havendo, contudo, um benefício nas secções para jusante do grupo electrobomba, exceptuando-se a secção S5 (distante 1500 m do reservatório de jusante) na qual há um agravamento. No que respeita as pressões máximas, a configuração B é mais favorável em todas as secções de cálculo. A configuração C, não obstante conduzir a um agravamento das pressões máximas na conduta a jusante do grupo electrobomba conduz a alturas piezométricas mínimas sempre positivas.

Deste exemplo pode concluir-se ser difícil resolver o problema da ocorrência de pressões mínimas muito baixas com a deslocação do grupo electrobomba. Esta deslocação pode ser mais proveitosa no caso de o perfil da conduta ser favorável (perfil côncavo) e se o problema a resolver for o de diminuir as pressões máximas: na secção S5, por exemplo, a altura piezométrica máxima para o perfil da configuração A é 36,6 m enquanto que para o perfil da configuração B é 26,7 m.

Para a configuração A seria mais eficaz aumentar o valor do PD^2 por intermédio de volantes de inércia pois deixariam de ocorrer pressões subatmosféricas e diminuiriam ligeiramente as pressões máximas.

É de referir que na escolha do comprimento da conduta de aspiração há que atender às condições de funcionamento em regime permanente, em particular no que concerne a ocorrência da cavitação na conduta e nas bombas.

QUADRO 7.1 - Exemplo de aplicação. Cotas topográficas e valores das alturas piezométricas extremas para as três configurações consideradas na Figura 4 ($\bar{\rho}$ = 3,4 e λ = 0,21)

Perfil da conduta (Figura 4)		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
Configuração A	Z (m)	5,0	5,0	10,2	12,8	15,4	17,9	20,5	23,1	25,7	28,3
	Y_m (m)	-0,6	-0,9	-0,3	-7,2	-8,5	-9,1	-9,1	-8,0	-5,6	-1,5
	Y_M (m)	53,2	50,1	40,7	40,1	36,6	33,0	28,8	24,0	18,6	12,9
Configuração B	Z (m)	5,0	5,0	10,2	12,8	15,4	17,9	20,5	23,1	25,7	28,3
	Y_m (m)	-1,1	-4,1	-13,1	-6,6	-9,5	-8,7	-6,2	-3,4	-2,7	-0,2
	Y_M (m)	11,9	16,9	15,0	33,1	26,7	25,7	22,9	20,6	18,6	12,6
Configuração C	Z (m)	2,5	0	0	0	0	0	0	0	15,7	25,3
	Y_m (m)	1,4	0,4	2,9	6,2	5,9	9,2	14,3	19,7	7,3	2,8
	Y_M (m)	14,[illegible]	21,9	25,2	45,9	42,1	43,6	43,4	43,7	28,6	15,6

PARTE II — Exploração do Modelo RESBOM

8. PARÂMETROS ADIMENSIONAIS BÁSICOS

Na exploração sistemática de um modelo, matemático ou físico, há que ter em conta a análise dimensional, tendo em vista a caracterização dos sistemas e das condições de cálculo por parâmetros adimensionais. A utilização adequada destes parâmetros permite uma generalização racional dos resultados obtidos por via das simulações numéricas e uma apreciável redução no número de cálculos a efectuar.

No estabelecimento dos parâmetros adimensionais há que distinguir as grandezas do fenómeno hidráulico (golpe de ariete provocado pela saída de serviço dos grupos electrobomba) e as grandezas que caracterizam os efeitos numéricos relacionados com a técnica de integração adoptada. No que respeita o caso em estudo, as grandezas do primeiro grupo mais relevantes de acordo com as hipóteses básicas admitidas, são as seguintes (Figura 1):

Variação de cota piezométrica	ΔH
Velocidade inicial do escoamento	V_o
Velocidade de rotação inicial do grupo	V_g
Comprimento da conduta de aspiração	L_1
Comprimento total da conduta elevatória	L_3
Área da secção transversal da conduta elevatória	S
Inércia das massas girantes ($MD^2 = PD^2/g$)	MD^2
Altura total de elevação inicial	H_{bo}
Perda carga total inicial	ΔH_o
Celeridade das ondas elásticas	c
Massa volúmica de água	ρ
Aceleração da gravidade	g

De entre as 12 grandezas intervenientes, escolhem-se três grandezas-base dimensionalmente independentes: ρ, V_o e H_{bo}. De acordo com o teorema de Vaschy-Buckingham, o fenómeno hidráulico pode então ser caracterizado por nove parâmetros adimensionais (λ_1, λ_s, λ_Δ, λ_c, λ_g, λ_B, λ_3, λ_λ e λ_H) definidos no Anexo 2. A experiência na análise do golpe de ariete indica, contudo, que as condições de semelhança podem ser menos exigentes, sendo admissível considerar um menor número de parâmetros adimensionais por multiplicação de alguns dos parâmetros indicados no Anexo 2. Assim, os parâmetros adimensionais fundamentais escolhidos para o presente estudo são os seguintes (ALMEIDA e CUNHA, 1983):

Parâmetro característico da conduta,

$$\bar{\rho} = \frac{\lambda_c}{\lambda_g} = \frac{c\,V_o}{g\,H_{bo}}$$

Coeficiente de compensação energética,

$$\lambda = K_N^2 \frac{PD^2 \; N_o^2}{\gamma \; S \; L_3 \; V_o^2} = \frac{\lambda_I \; \lambda_V^2}{\lambda_3 \; \lambda_s}$$

(sendo $V_g = K_N \; N_o$, com V_g em rad/s e N_o em r.p.m.)

Parâmetros de comprimento, $\lambda_B = \frac{L_1}{L_3}$ e $\lambda_3 = \frac{L_3}{H_{bo}}$

Parâmetros da variação de cota piezométrica, $\lambda_H = \frac{\Delta H}{H_{bo}}$ (λ_{HM} e λ_{Hm})

Parâmetro da perda de carga, $\lambda_\Delta = \frac{\Delta H_o}{H_{bo}}$

sendo K_N um parâmetro de conversão numérica de unidades e ΔH as variações extremas de cota piezométrica (diferença entre as cotas piezométricas máxima e mínima e a cota piezométrica estática, respectivamente para λ_{HM} e λ_{Hm}).

O parâmetro característico $\bar{\rho}$ traduz a relação entre a energia cinética inicial da coluna líquida e a energia potencial de deformabilidade elástica. O coeficiente de compensação energética λ traduz a relação entre a energia inicial das massas girantes do grupo electrobomba equivalente e a energia cinética inicial da coluna líquida. Desta forma, λ pode ser definido do seguinte modo:

$$\lambda = \frac{E_g}{E_c} \tag{20}$$

sendo:

$$E_g = \frac{PD^2 \; N_o^2}{7153} \tag{21}$$

$$E_c = 0{,}5 \; \rho \; S \; L_3 \; V_o^2 \tag{22}$$

com PD^2 em N.m², N_o em r.p.m., ρ em kg/m³, S em m², L_3 em m e V_o em m/s.

No que respeita os parâmetros referentes aos efeitos numéricos foram seleccionados, para o presente estudo, os parâmetros C_r (número de Courant) e NO (número de onda) que foram definidos em 5 (Parte I).

No que respeita as características hidromecânicas das bombas hidráulicas, a respectiva caracterização, tendo em vista a análise do golpe de aríete, pode ser tentada a partir do parâmetro N_s, número específico de rotações.

9. METODOLOGIA SEGUIDA NA EXPLORAÇÃO DO MODELO

Na exploração sistemática do modelo matemático RESBOM (descrito na Parte I) fizeram-se variar os valores dos parâmetros λ_B, λ e $\bar{\rho}$:

— consideraram-se oito posições para o grupo electrobomba equivalente (valores de λ_B compreendidos entre 0 e 0,7);

— para cada valor de λ_B consideraram-se 11 valores para o PD^2 sendo o valor mínimo 300 N.m² e os restantes obtidos por sucessivas duplicações (valores de λ compreendidos entre 0,025 e 26,5);

— para cada par de valores de λ_B e λ fez-se variar o valor da celeridade entre 300 m/s e 1000 m/s o que corresponde a considerar oito valores para o parâmetro $\bar{\rho}$ (valores de $\bar{\rho}$ compreendidos entre 1,3 e 4,3).

As simulações foram efectuadas com λ_Δ = NO = 0,10, variando os valores de C_r entre a unidade e 0,50 à excepção de duas situações correspondentes a λ = 0,025 sendo, respectivamente, $\bar{\rho}$ = 1,3 (C_r = 0,34) e $\bar{\rho}$ = 1,7 (C_r = 0,45). As variações dos parâmetros são efectuadas de modo automático de acordo com as instruções de um programa adicional do programa RESBOM. Foram também executados alguns cálculos de sensibilidade para avaliação dos efeitos, nos resultados, de diferentes valores do passo de cálculo Δt (influência de C_r) e da perda de carga inicial (influência de λ_Δ). No âmbito do presente trabalho executaram-se cerca de 1500 simulações numéricas tendo sido escolhido, como sistema elevatório base, o sistema com a configuração B do exemplo de aplicação apresentado em 7 (parte I) e considerando um grupo electrobomba equivalente com N_s = 78 r.p.m..

10. RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES

10.1 — Objectivos do estudo

No estudo efectuado, a exploração do programa de cálculo ou modelo matemático RESBOM teve por objectivo principal a obtenção das variações extremas da cota piezométrica ao longo da conduta elevatória, para diferentes valores de λ_B, λ e $\bar{\rho}$, decorrentes da saída de serviço do grupo electrobomba. Na continuação de estudos anteriores (ALMEIDA, 1981), houve também o interesse em obter o tempo de anulação do caudal na bomba (T_a) e a velocidade de rotação do grupo no instante de fechamento da válvula de retenção (N_a). No presente artigo apresenta-se uma súmula dos resultados obtidos e da análise efectuada os quais são descritos com pormenor em ALMEIDA e CUNHA, 1983.

10.2 — Variações das cotas piezométricas

As variações extremas da cota piezométrica são apresentados de forma adimensional pelos parâmetros λ_H cujos valores, em cada secção de cálculo, são obtidos do seguinte modo (Figura 1):

— Secções a jusante do grupo electrobomba

$$\begin{aligned} \lambda_{HM} &= \Delta H_M / H_{bo} = (H_M - Z_J) / H_{bo} \\ \lambda_{Hm} &= \Delta H_m / H_{bo} = (H_m - Z_J) / H_{bo} \end{aligned} \tag{23}$$

— Secções a montante do grupo electrobomba

$$\lambda_{HM} = \Delta H_M / H_{bo} = (H_M - Z_M) / H_{bo}$$
$$\lambda_{Hm} = \Delta H_m / H_{bo} = (H_m - Z_M) / H_{bo} \qquad (24)$$

em que H_M = cota piezométrica máxima, H_m = cota piezométrica mínima, Z_M = cota do nível de água no reservatório de montante, Z_J = cota de nível de água no reservatório de jusante e H_{bo} = altura total de elevação inicial. As simulações foram efectuadas com 12 secções de cálculo correspondendo as secções 0 e 11 respectivamente à secção de entrada na conduta de aspiração (junto ao reservatório de montante) e à secção de saída da conduta elevatória (junto ao reservatório de jusante). Nestas duas secções os valores de λ_H são sempre nulos.

A exploração sistemática do programa de cálculo RESBOM correspondeu à obtenção de um elevado número de resultados cuja compilação, apresentação e análise não é fácil de apresentar. No presente artigo faz-se unicamente uma síntese dos resultados mais importantes que poderão, eventualmente, ter interesse prático no projecto de sistemas elevatórios.

Nas Figuras 5 e 6 indicam-se os valores de λ_{HM} e de λ_{Hm}, respectivamente a montante e a jusante do grupo, para cinco valores de λ (λ = 0,4; 0,8; 1,6; 3,3 e 6,6) e para diferentes valores de λ_B (diferentes localizações do grupo electrobomba equivalente) mantendo-se constante o valor de $\bar{\rho}$ ($\bar{\rho}$ = 3,0). Por seu turno, nas Figuras 8 e 9 indicam-se os valores de λ_{HM} e de λ_{Hm} nas mesmas secções de cálculo anteriores mas em função do parâmetro $\bar{\rho}$, para três valores de λ (λ = 0,4; 1,6 e 6,6) e para três valores de λ_B (λ_B = 0,2; 0,3 e 0,4). Na Figura 7 indicam-se os valores extremos de λ_{HM} e de λ_{Hm} ao longo da conduta (envolventes) no caso de λ_B = 0,3, para três valores de λ (λ = 0,4; 1,6 e 6,6) e dois valores de $\bar{\rho}$ ($\bar{\rho}$ = 1,3 e 4,3).

Dos resultados obtidos no estudo podem retirar-se, entre outras, as seguintes conclusões:

— para valores de λ superiores a três, os efeitos elásticos deixam de ser significativos (influência pouco significativa do parâmetro $\bar{\rho}$) passando as envolventes dos valores extremos de λ_H a serem lineares (comportamento como coluna rígida);

— para valores de λ inferiores a três, a influência de $\bar{\rho}$ faz-se sentir de forma oscilatória (Figura 8 e 9) nos valores de λ_{HM} a jusante do grupo e de λ_{Hm} a montante do grupo;

— em termos práticos e para valores de $\bar{\rho}$ superiores a dois, os efeitos elásticos deixam de ter influência relevante em λ_H para $\lambda > 0,8$ e as envolventes passam a ser quase lineares para $\lambda > 1,6$;

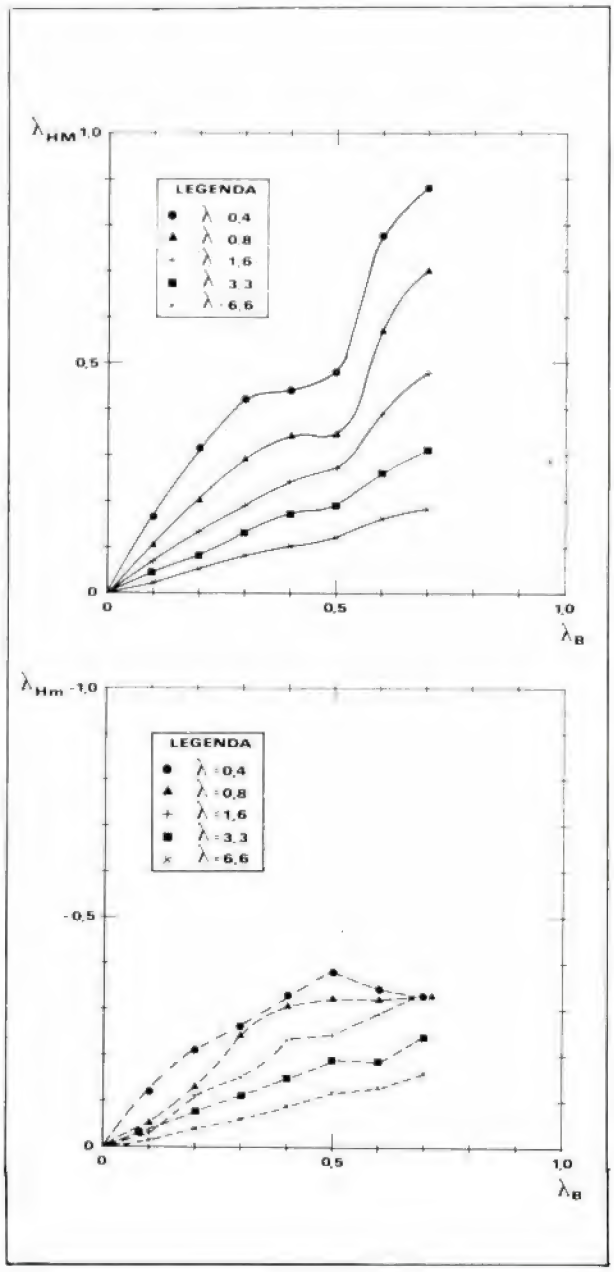
— para elevados valores de λ, os valores de λ_{Hm} correspondentes às mesmas secções de cálculo a jusante do grupo tendem a ser os mesmos qualquer que seja o valor de λ_B;

— a ocorrência de cotas piezométricas no grupo possibilitando o funcionamento de um "by-pass", para protecção contra o golpe de aríete, é muito difícil (e.g. para λ_B = 0 tal só ocorre para $\bar{\rho} < 0,21$).

Do ponto de vista prático, foi possível encontrar uma regra de redistribuição de valores de λ_H nas secções adjacentes ao grupo, válida para elevados valores de λ ($\lambda > 2,5$):o valor de λ_{HM} na secção de jusante do grupo no caso de λ_B = 0 é igual à soma, em valor absoluto, dos valores de λ_{HM} e de λ_{Hm} correspondentes, respectivamente, às secções de jusante e de montante do grupo no caso de $\lambda_B \neq 0$ e, de modo equivalente, o valor de λ_{Hm} na secção de jusante do grupo para λ_B = 0 é igual à soma, em valor absoluto, dos valores de λ_{HM} e de λ_{Hm} correspondentes, respectivamente, às secções de montante e de jusante do grupo no caso de $\lambda_B \neq 0$.

FIGURA 5 –

VALORES DE λ_{HM} E λ_{Hm} NA SECÇÃO IMEDIATAMENTE A MONTANTE DO GRUPO PARA DIFERENTES VALORES DE λ_B E λ ($\bar{\rho}$ = 3,0 E λ_Δ = 0,10)



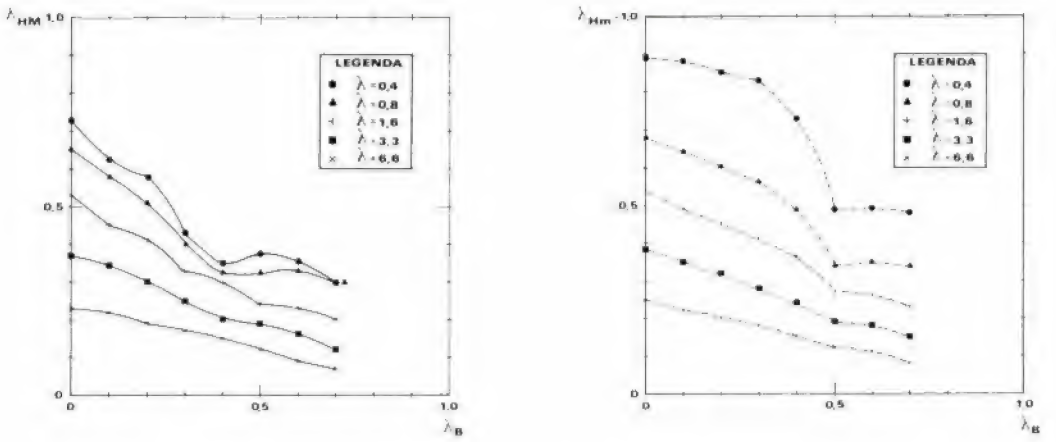


FIGURA 6 - VALORES DE λ_{HM} E λ_{Hm} NA SECÇÃO IMEDIATAMENTE A JUSANTE DO GRUPO PARA DIFERENTES VALORES DE λ_B E λ ($\bar{\rho}$=3,0 E λ_Δ=0,10)

10.3 — Tempo de anulação do caudal

No Quadro 10.1 apresentam-se os valores de razão T_a/T_w, tempo de anulação do caudal no grupo electrobomba sobre tempo de inércia rígida, em função de alguns valores de λ e de λ_B, para $\bar{\rho}$ = 3,0.

De acordo com os resultados obtidos, T_a tende a ser superior a T_w e pode depender de $\bar{\rho}$. A influência deste último parâmetro tende a atenuar-se à medida que o valor de λ aumenta: para λ_B = 0, T_a / T_w varia entre 1,71 e 1,49 e entre 5,06 e 4,60, respectivamente para valores de λ de 0,4 e 6,6, correspondendo os limites de variação a valores de ρ de 1,3 e 4,3.

10.4 — Energia útil de rotação das massas girantes

Conforme é conhecido (ALMEIDA, 1981), a energia cinética inicial das massas girantes de um grupo electrobomba não é, em geral, totalmente cedida à coluna líquida após a anulação do binário motor e início do regime transitório. Com efeito, para valores elevados de λ, o valor da velocidade de rotação do grupo no instante em que se anula o caudal na bomba, N_a, tende a ser uma fracção significativa do valor inicial N_o.

No quadro 10.2 apresentam-se os valores da razão N_a / N_o em função de alguns valores de λ e λ_B, para $\bar{\rho}$ = 1,3 e $\bar{\rho}$ = 4,3. Os resultados apresentados evidenciam que o comportamento como coluna rígida, isto é,

a não dependência relativamente aos parâmetros $\bar{\rho}$ e λ_B mantendo-se λ constante, é admissível para valores de λ > 3,3, no caso de $\bar{\rho}$ = 1,3 e de λ > 0,4 no caso de $\bar{\rho}$ = 4,3. Pode assim admitir-se que a energia útil das massas girantes E_u, é a seguinte:

$$E_u = (1 - N_a / N_o)\ E_g \qquad (25)$$

O valor de E_u e, por consequência, a eficiência de um eventual volante de inércia ou de massas adicionais, para protecção contra o golpe de aríete, vai diminuindo à medida que o valor de λ aumenta.

11. BREVE ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Para avaliação dos efeitos nos resultados dos valores de Δt e da perda de carga total inicial ΔH_o executaram-se alguns cálculos de sensibilidade com novos valores de C_l (um terço dos anteriores) e com novos valores de λ_Δ (λ_Δ = 0 e 0,14). Dos resultados obtidos podem retirar-se as seguintes conclusões:

— nas secções imediatamente a jusante do grupo electrobomba, o valor de λ_{Hm} é um pouco afectado pela diminuição de Δt; pelo contrário, nas secções mais próximas do reservatório de jusante, os valores de λ_{Hm} mostram-se ser muito sensíveis à variação de Δt;

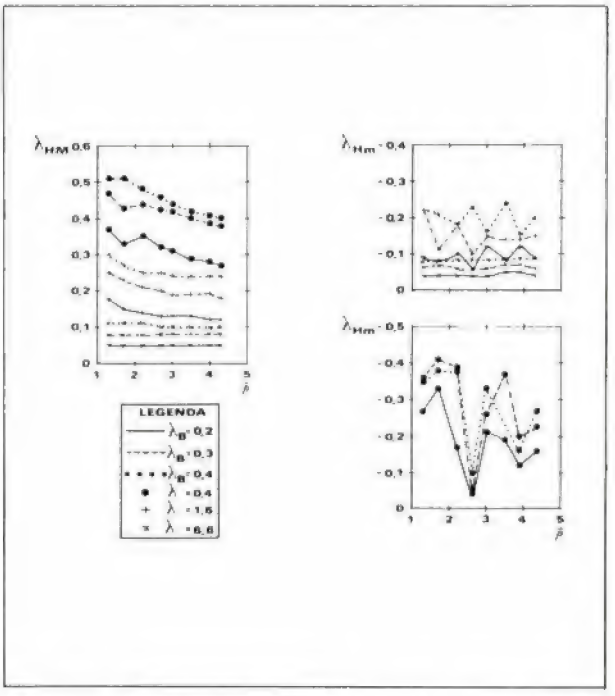


FIGURA 8- VALORES DE λ_{HM} E λ_{Hm} NA SECÇÃO IMEDIATAMENTE A MONTANTE DO GRUPO PARA DIFERENTES VALORES DE $\bar{\rho}$, λ_B E λ (λ_Δ = 0,1)

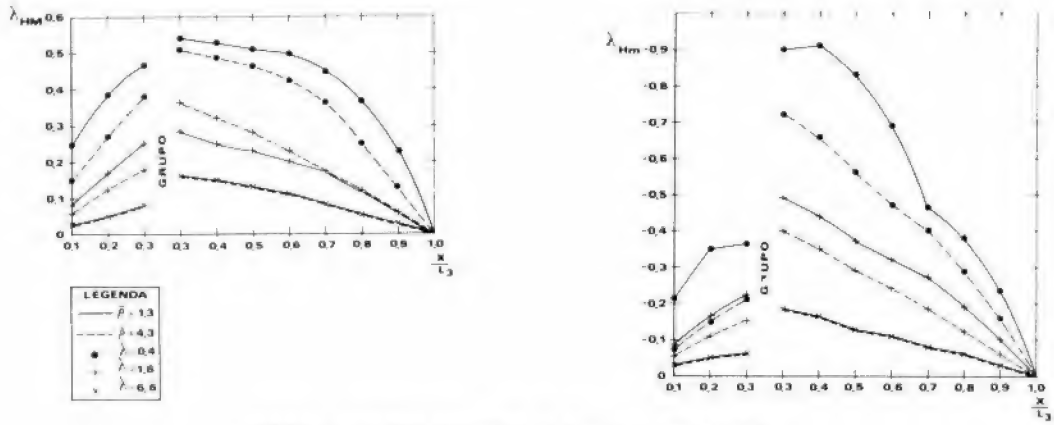


FIGURA 7 – VALORES EXTREMOS DE λ_{HM} E λ_{Hm} AO LONGO DA CONDUTA PARA DIFERENTES VALORES DE $\bar{\rho}$ E λ (λ_B=0,3 E λ_Δ=0,1)

QUADRO 10.1 — Valores de T_a / T_w em função de λ_B e de λ no caso de $\bar{\rho}$ = 3,0 (T_w = 0,5 $\bar{\rho}$ T_E).

λ \ λ_B	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7
0,4	1,50	1,47	1,47	1,44	1,40	1,34	1,40	1,40
0,8	1,80	1,74	1,70	1,64	1,64	1,60	1,54	1,50
1,6	2,34	2,27	2,20	2,17	2,10	2,07	2,04	2,00
3,3	3,17	3,14	3,07	3,00	2,94	2,87	2,84	2,80
6,6	4,71	4,64	4,57	4,50	4,44	4,40	4,34	4,27

QUADRO 10.2 — Valores de N_a / N_o em função de λ e de λ_B ($\bar{\rho}$ = 1,3 e 4,3).

λ \ λ_B	$\bar{\rho}$ = 1,3				$\bar{\rho}$ = 4,3			
	0	0,2	0,4	0,6	0	0,2	0,4	0,6
0,4	0,132	0,208	0,111	0,199	0,248	0,249	0,249	0,249
0,8	0,290	0,329	0,260	0,274	0,339	0,338	0,337	0,337
1,6	0,450	0,442	0,420	0,404	0,440	0,440	0,439	0,439
3,3	0,535	0,535	0,533	0,528	0,534	0,534	0,534	0,533
6,6	0,606	0,607	0,608	0,607	0,608	0,608	0,608	0,608

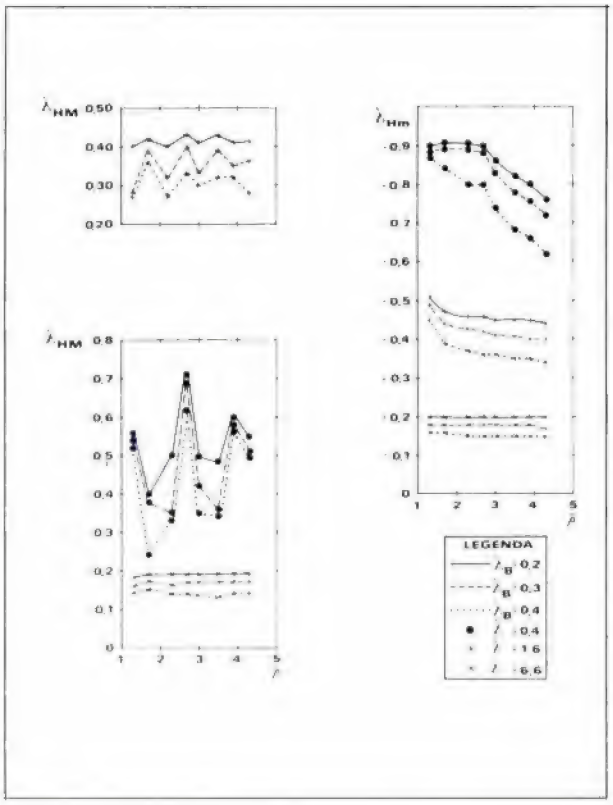


FIGURA 9– VALORES DE λ_{HM} E λ_{Hm} NA SECÇÃO IMEDIATAMENTE A JUSANTE DO GRUPO PARA DIFERENTES VALORES DE $\bar{\rho}, \lambda_B$ E $\lambda (\lambda_\Delta = 0,1)$

— para valores crescentes de $\bar{\rho}$ acentua-se a diminuição dos valores de λ_{HM} motivada por amortecimento numérico (valores de C_r menores);

— a perda de carga faz diminuir, em valor absoluto, o valor de λ_{Hm} e diminuir as cotas piezométricas máximas; para elevados valores de λ, as cotas piezométricas não excedem as cotas correspondentes ao regime permanente inicial ($\lambda_\Delta = 0,14$);

— a perda de carga tende a retardar a anulação do caudal nas bombas e a diminuir o valor de N_a / N_o.

Concluiu-se também que a determinação das cotas piezométricas mínimas considerando nulas as perdas de carga e admitindo que a cota do reservatório de jusante se eleva de ΔH_o, o que equivaleria a manter o valor de H_{bo}, pode conduzir a resultados contra a segurança.

12. CONSIDERAÇÕES E RECOMENDAÇÕES FINAIS

O programa de cálculo RESBOM, desenvolvido no CEHIDRO no âmbito do presente trabalho, está apto a executar simulações sistemáticas tendo em vista a elaboração de tabelas de cálculo para análise dos efeitos do golpe de aríete. Os parâmetros adimensionais seleccionados e utilizados no presente trabalho parecem ser adequados à caracterização dos regimes transitórios em condutas elevatórias.

Há ainda que esclarecer ou analisar com maior cuidado os efeitos numéricos (atenuação ou dispersão) dependentes, fundamentalmente dos parâmetros adimensionais designados por números de Courant e de onda. É ainda de aconselhar a execução de uma análise sistemática dos efeitos resultantes das perdas de carga, da variação do rendimento dos grupos e de diferentes valores do parâmetro N_s das bombas hidráulicas. A interacção das válvulas de retenção como escoamento e os eventuais atrasos ou antecipações no fechamento das mesmas poderão modificar os resultados obtidos e apresentados no presente artigo. A ocorrência de pressões subatmosféricas pode modificar o valor da celeridade e provocar a rotura da coluna líquida em zonas localizadas da conduta elevatória. Estes efeitos resultantes do fenómeno da macrocavitação transitória deverão ser considerados na análise dos regimes transitórios em sistemas hidráulicos reais (ALMEIDA, 1981).

13. AGRADECIMENTOS

Os autores e o CEHIDRO agradecem a colaboração que têm recebido do Centro Tecnológico Geral do Saneamento Básico no apoio a estudos relacionados com regimes transitórios em condutas elevatórias. Os autores agradecem também a colaboração prestada pelo Eng.º Alexandre Borga na fase inicial do trabalho.

14. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALMEIDA, A.B. — *Regimes Hidráulicos Transitórios em Condutas Elevatórias.* Tese de Doutoramento, IST, 1981.

ALMEIDA, A.B. — *Manual de Protecção contra o Golpe de Aríete em Condutas Elevatórias.* LNEC, 1982.

ALMEIDA, A.B.; CUNHA, P.F. — *Golpe de Aríete em Condutas Elevatórias. Análise dos Efeitos de Condutas de Aspiração Longas.* CEHIDRO, 1983.

CHAUDHRY, M.H. — *Applied Hydraulic Transients.* Van Nostrand, 1979.

FOX, J.A. — *Hydraulic Analysis of Unsteady Flow in Pipe Networks.* McMillan, London, 1977.

PAVLUCH, L. — *Suction Line Effects on Transients in Centrifugal Pump Schemes.* IAHR, Symposium 1970, paper J2, 1970.

WIGGERT, D.C.; SUNDQUIST, M.J. — *Fixed-Grid Characteristics for Pipeline Transients.* Journal of the Hydraulics Division, ASCE, vol. 103, HY 12, 1977, p. 1403-1416.

WYLIE, E.B.; STREETER, V.L. — *Fluid Transients.* McGraw-Hill, 1978.

ANEXO 1

Os parâmetros adimensionais $\bar{\rho}$ e λ, utilizados neste artigo e que são apresentados na Parte II, são definidos do seguinte modo:

$\lambda = Eg / Ec$

sendo

$Eg = PD^2 \, N_o^2 / 7153$ (energia cinética das massas girantes)

$Ec = 0{,}5 \, \rho \, L_s \, S \, V_o^2$ (energia cinética da coluna líquida)

e

$\bar{\rho} = c \, V_o / (gH_{bo})$

em que PD_2 = parâmetro característico da inércia do grupo electrobomba em $N.m^2$; N_o = velocidade de rotação inicial em r.p.m.; L_3 = comprimento total da conduta; S = área da secção transversal da conduta; V_o = velocidade inicial do escoamento em m/s; c = celeridade das ondas elásticas em m/s e H_{bo} = altura total de elevação das bombas em m c.a..

ANEXO 2

Os nove parâmetros adimensionais referidos no presente artigo são os seguintes:

1) Parâmetro da inércia do grupo

$$\lambda_I = \frac{MD^2}{\rho \, H_{bo}^5} = \frac{PD^2}{\gamma \, H_{bo}^5}$$

2) Parâmetro da secção da conduta $\lambda_S = \dfrac{S}{H_{bo}^2}$

3) Parâmetro da perda de carga $\lambda_\Delta = \dfrac{\Delta H_o}{H_{bo}}$

4) Parâmetro da celeridade (inverso do número de Mach) $\lambda_c = \dfrac{c}{V_o}$

5) Parâmetro da gravidade $\lambda_g = \dfrac{g \, H_{bo}}{V_o^2}$

6) Parâmetros de comprimentos $\lambda_B = \dfrac{L_1}{L_3}$

$$\lambda_3 = \frac{L_3}{H_{bo}}$$

7) Parâmetro da velocidade periférica do grupo $\lambda_V = \dfrac{V_g \, H_{bo}}{V_o}$

8) Parâmetro de variação de cota piezométrica $\lambda_H = \dfrac{\Delta H}{H_{bo}}$

DETERMINAÇÃO DE DISTÂNCIAS INTERATÓMICAS A PARTIR DA ESTRUTURA FINA QUE SE PROLONGA PARA ALÉM DA DESCONTINUIDADE DE ABSORÇÃO DOS RAIOS X

MARIA ISABEL GASPAR DE BARROS ALVES MARQUES

Professora Auxiliar do I.S.T.

RESUMO

É projectada uma montagem experimental que permite obter um espectro de EXAFS. A montagem descrita utiliza como fonte o radiamento de distribuição espectral contínua duma ampola de raios X, de ânodo rotativo. Os espectros obtidos, por transmissão, permitem a determinação de distâncias interatómicas com um rigor de 0,01 A. É feita uma breve referência à análise de Fourier da função χ (k), que dá conta das variações relativas que sofre o coeficiente de absorção ao longo do espectro: conhecidos os parâmetros intratómicos, as diferenças de fase e a amplitude da onda rectrodifundida, é possível obter grandezas interatómicas — a distância entre átomos vizinhos e o número de coordenação respectivo.

1. INTRODUÇÃO

A estrutura fina que se prolonga para além da descontinuidade do espectro de absorção dos raios X duma determinada substância, conhecida por EXAFS — "Extendend X-ray Absorption Fine Structure" — é devida às oscilações do coeficiente de absorção dos raios X que se podem observar quando os valores da energia variam desde 50 eV até cerca de 1000 eV acima da descontinuidade de absorção.

A primeira teoria interpretativa do fenómeno, devida a Kronig, surgiu em 1931 para o caso dum cristal (estado sólido) e um ano depois para um gás. O mau acordo quantitativo entre as primeiras teorias que apareceram, e os resultados experimentais, fizeram com que só quarenta anos depois, em 1971, com a publicação das investigações de A. Stern, F. W. Lytle e E. Sayers se pudesse utilizar a EXAFS como técnica experimental.

A EXAFS permite a determinação de distâncias interatómicas na matéria condensada. A vantagem em relação à difracção dos raios X é permitir conhecer a estrutura em torno de cada espécie de átomo separadamente.

Este método de investigação da estrutura interatómica tem sido na última década aplicado a sistemas de multicomponentes, na biologia, na química inorgânica, para determinar a estrutura de soluções aquosas, de catalisadores, ou detectar a presença de impurezas em sólidos.

A EXAFS necessita duma fonte de raios X contínua. Esta técnica teve um grande desenvolvimento quando se pode usar como fonte a radiação de um sincrotrão, que permite obter os mesmos espectros durante menores tempos de exposição.

2. O FENÓMENO DA EXAFS, SEU FORMALISMO

O fenómeno da EXAFS, as oscilações do coeficiente de absorção dos raios X em função da energia, foi explicado por Kronig considerando a modificação do estado final do fotoelectrão pelos átomos que circundam o átomo central, quando sobre este incide um fotão de raios X de energia superior à descontinuidade de absorção. A modificação do estado final foi atribuída ao efeito das interferências junto do núcleo resultantes da onda de matéria associada ao fotoelectrão que parte do átomo absorvente e que é rectrodifundida por cada um dos átomos vizinhos. As interferências dão origem aos máximos e mínimos no espectro da

Original recebido para publicação em 18/12/84.

EXAFS de acordo com a diferença de fase correspondente. As amplitudes das oscilações podem ser da ordem de 10% ou superiores em relação à curva monotónica a seguir à descontinuidade de absorção dum átomo isolado.

A expressão que traduz este fenómeno pode escrever-se

$$\chi(k) = \frac{\mu - \mu_o}{\mu_o} = - \sum_j \frac{N_j}{r_j^2 k} \, | f_j(k, \pi) | \, \mathrm{sen}\,(2k\, r_j + \psi_j(k))\, e^{-2\sigma_j^2 k^2}\, e^{-\frac{2 r_j}{\lambda_j(k)}} \quad (1)$$

em que

μ é o coeficiente de absorção linear medido experimentalmente

μ_o é o coeficiente de absorção do átomo não perturbado

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ é a grandeza do vector número de ondas do fotoelectrão

$| f_j(k, \pi) |$ é a amplitude da onda rectrodifundida elasticamente

$$f_j(k, \pi) = | f_j(k, \pi) | \, e^{i \varnothing(k)} \quad (2)$$

r_j é a distância do átomo absorvente à camada de coordenação j

N_j é o número de átomos à distância r_j

$2k\, r_j$, no argumento do seno, traduz a diferença de fase introduzida pela ida e volta da onda desde o átomo central a um átomo vizinho

$\psi(k) = \theta(k) + 2\,\delta'_j(k)$ é a diferença de fase total sofrida pelo fotoelectrão, soma da diferença de fase $\theta(k)$, da onda rectrodifundida, com o dobro da diferença de fase $\delta'_j(k)$ introduzida pelo potencial do átomo absorvente (fotoexcitado)

$e^{-2\sigma_j^2 k^2}$ é um factor do tipo de Debye-Waller que no caso dum sólido faz intervir o efeito das vibrações térmicas e num líquido as variações de posição das partículas

$e^{-\frac{2 r_j}{\lambda_j(k)}}$ é um factor de declíneo que se torna necessário introduzir porque o efeito de interferência se atenua tanto mais quanto maior é a distância dos átomos vizinhos ao átomo central; é habitual chamar a $\lambda_j(k)$ livre percurso médio electrão - electrão.

As modulações em $\chi(k)$ são assim determinadas por $| f_j(k, \pi) |$ e pelo termo sinusoidal. As outras contribuições são independentes de k ou decrescem monotonicamente com k.

3. A MONTAGEM EXPERIMENTAL

Para obter um espectro de EXAFS é necessário dispor duma fonte de raios X que forneça um espectro contínuo intenso e dum espectrómetro com um adequado sistema de detecção.

A. A Fonte

A fonte de raios X escolhida para este projecto é uma ampola de raios X de ânodo rotativo e de foco fino desmontável, que permite obter um espectro contínuo suficientemente intenso.

O elemento do anticátodo pode ser a prata, o molibdénio ou outro de acordo com o espécimen em estudo, uma vez que os anticátodos são fáceis de substituir neste tipo de ampolas.

O cátodo é constituído por um filamento helicoidal de tungsténio que permite fazer incidir sobre o ânodo o feixe de electrões numa região cujas dimensões se podem modificar por simples adaptação de uma cúpula metálica. Assim, para estudos da descontinuidade de absorção K de elementos de número atómico médio, a "mancha" focal escolhida tem 0,5x5mm e para elementos de número atómico elevado 0,2x2mm.

Este tipo de ampolas (de ânodo rotativo) pode apresentar por vezes problemas de instabilidade mecânica que se traduzem numa certa tremura da mancha focal sobre o ânodo. A ampola escolhida deverá ser de uma marca que garanta uma estabilidade mecânica de 5 μm.

O ângulo de saída do feixe pode variar entre 0 e 12°. Escolhemos um ângulo de saída da ordem de 3° o que dá para dimensões aparentes da mancha focal sobre o ânodo (projectada segundo o ângulo de 3°) 0,025x5mm e 0,01x2mm respectivamente.

O ânodo tem a velocidade de rotação de 3000 ou 6000 r.p.m. de acordo com a potência que pretendemos utilizar.

A ampola pode trabalhar com uma tensão máxima de 60 kV e a corrente máxima de 300 mA, o que corresponde a uma potência máxima de 15 kW (para uma mancha focal de 0,5x10mm e para um anticátodo de cobre). Esta potência é dez vezes superior à potência que pode suportar uma ampola de ânodo não rotativo para o mesmo anticátodo e para dimensões da região focal da mesma ordem de grandeza. Para as dimensões das manchas focais escolhidas os valores da potência máxima que a ampola pode suportar são respectivamente de 10,0 kW e de 3,0 kW.

A estabilização da tensão do cátodo e da corrente da ampola impede que as oscilações destas grandezas sejam superiores a 0,1%.

Uma ampola deste tipo necessita, para refrigerar o ânodo, de 55 l de água por minuto a uma temperatura inferior a 15° C e a uma pressão de 4 kg/cm2, o que exige um sistema de refrigeração em circuito fechado.

Um sincrotrão produz um feixe com maior densidade de fotões (cerca de 10^6 vezes superior, tendo em conta já a grande distância da fonte ao espécimen) e isto é uma vantagem relativamente às ampolas de ânodo rotativo, mas estas dão feixes cujas características são mais estáveis no decorrer do tempo, o que é muito importante.

As ampolas fornecem além do espectro contínuo o espectro característico do material que constitui o anticátodo (e o de uma ou outra impureza). Há pois que ter em conta esta circunstância escolhendo um anticátodo adequado ao espécimen a estudar. As riscas de emissão características do anticátodo podem ser utilizadas para calibrar a escala das energias, como se verá adiante e em particular as riscas de emissão duma impureza como o tungsténio, por exemplo, podem servir para verificar a linearidade da escala das energias.

A fonte escolhida permite obter o mesmo rigor que um sincrotrão na determinação de distâncias interatómicas, exigindo apenas maior tempo de exposição. Esta fonte tem ainda a vantagem de ser mais acessível à maior parte dos laboratórios de investigação.

B. O Espectrómetro

O espectrómetro deste projecto será constituído por um goniómetro horizontal θ - θ, no eixo do qual se monta um monocromador, e por um detector. Um goniómetro deste tipo permite que o monocromador rode de um ângulo θ enquanto o detector roda de um ângulo 2θ.

a. O monocromador

O monocromador é um cristal curvo montado de forma a reflectir o feixe proveniente da ampola. Outras opções seriam menos adequadas: um cristal plano reflecte com menor intensidade do que um cristal curvo; as montagens por transmissão permitem obter menor intensidade ainda que as montagens por reflexão.

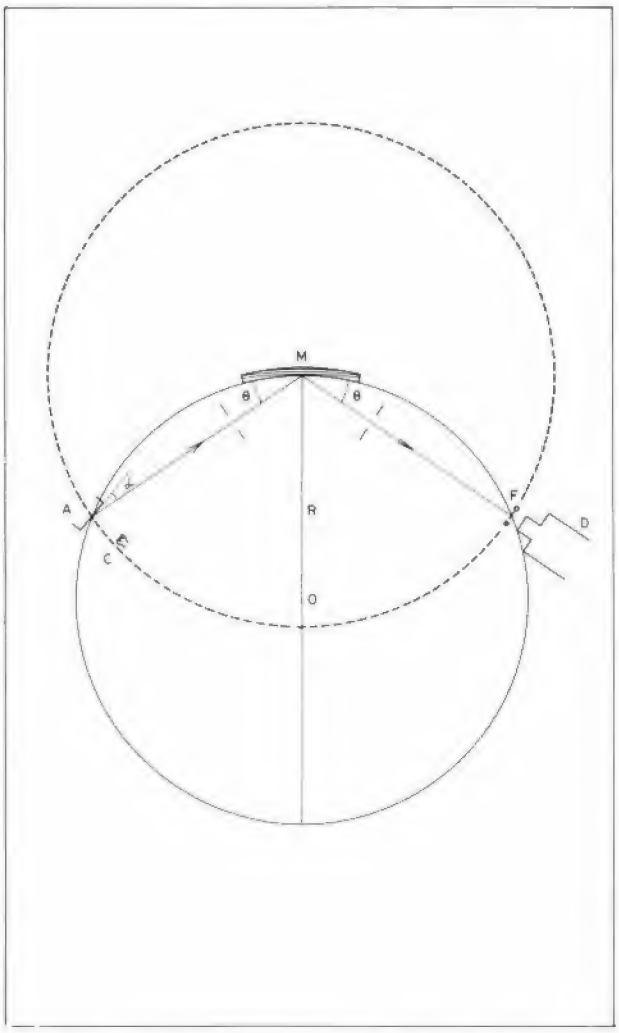


Fig.1 — Esquema da montagem experimental: C-cátodo, A-ânodo (rotativo), M-cristal monocromador com os planos recticulares curvados segundo 2R e a superfície exterior segundo R, F-fenda de bordos cilíndricos, D-detector. O ponto O é o centro do círculo de Rowland de raio R, e MF coincide com o raio do goniómetro. α representa o ângulo de saída do feixe de raios X e θ é o ângulo de Bragg.

A prensa deverá ser magnética para garantir a necessária regularidade da curvatura do cristal.

As dimensões úteis da lâmina cristalina (depois de montada na prensa) são 55x8mm.

A geometria escolhida foi a de Johanson (4). Assim as lâminas são talhadas com uma curvatura $2R$ e encurvadas numa prensa de raio R.

b. O Goniómetro

No eixo do goniómetro é montada a prensa com o cristal monocromador. O goniómetro que escolhemos com um raio de 20cm deverá assentar sobre uma plataforma que permita translacções paralelas à direcção do feixe de raios X que sai da ampola. A distância $\overline{AM}$ do centro do anticátodo ao monocromador será assim regulável. Por sua vez o sistema detector e fenda deverá também ser regulável, segundo a direcção do raio do goniómetro, para permitir ajustar a posição de focagem. Isto pode fazer-se substituindo o suporte fixo habitual do detector dum goniómetro horizontal, por um suporte munido dum "granzep", que permite que o detector execute translacções finas segundo o raio do goniómetro.

Tendo sido escolhida para o monocromador a geometria de Johanson, o centro do anticátodo da ampola de raios X assim como a fenda que precede o detector devem ser colocados sobre a circunferência (de focagem) que limita o círculo de Rowland (2) de raio R, fig. 1. A distância $\overline{AM}$ é igual à distância $\overline{MF}$ (do centro do monocromador ao ponto de focagem sobre a fenda do detector). O cristal monocromador terá assim os planos recticulares usados paralelos à superfície de talhe da lâmina do cristal ($\sigma = 0$).

A natureza e características do cristal monocromador deverão ser escolhidas de acordo com a energia da descontinuidade de absorção do elemento em questão. Assim, para estudar o espectro de EXAFS que se estende a seguir à descontinuidade K de um elemento de número atómico médio, como por exemplo o bromo (Z = 35), a lâmina do cristal monocromador que se sugere é o fluoreto de lítio talhada paralelamente aos planos (200). Esta lâmina tem um poder reflector intenso, e a distância d entre os planos recticulares vale $2d = 4{,}028$ Å. O ângulo de Bragg para a descontinuidade de absorção K do bromo, à qual corresponde a energia de 13473,7 eV é $\theta = 13{,}21°$. Para uma prensa de raio $R = 450$mm obtém-se $\overline{AM} = \overline{MF} = 200$mm; este cálculo foi feito não para o valor de θ indicado mas para um valor $\theta_{med} = 12{,}85°$ compreendido entre o maior e o menor valor do ângulo de Bragg, usado para se descrever um espectro de EXAFS. O raio do círculo de Rowland foi escolhido de forma a que fosse possível obter um espectro de EXAFS intenso com uma resolução suficiente.

Para as distância referidas, e utilizando a mancha focal com a maior dimensão na posição vertical, a janela de entrada do monocromador, que se encontra a 160mm do anticátodo, deverá ter uma largura de 8mm e uma altura de 5,5mm. Estas condições produzirão sobre a lâmina do monocromador uma mancha cujas dimensões máximas são 45mm de largura e 6mm de altura, o que é aconselhável, em face das dimensões úteis da lâmina (55x8mm). Evitar-se-á assim que o feixe incida nos bordos da prensa ou em regiões limítrofes da lâmina cristalina. A janela de saída do monocromador, a 40mm do seu centro terá uma largura e uma altura ligeiramente superiores respectivamente a 8mm e a 6mm, afim de evitar que o feixe que é reflectido pelo monocromador seja diafragmado pelos bordos da janela de saída; esta permite evitar a passagem de raios X parasitas.

Embora a mancha focal sobre o anticátodo seja usada com a maior dimensão vertical, a sua altura e a geometria da montagem não exigem a utilização de fendas de Soller. À dimensão do ânodo projectado de 0,025x5mm corresponde sobre a fenda de entrada do detector uma mancha de altura inferior a 7mm o que dá uma divergência em altura de 0,1°.

A fenda do detector deverá ter a largura de 0,025mm.

Entre a janela de saída da ampola e a janela de entrada do monocromador será montado um colimador cilíndrico; e outro entre a janela de saída do monocromador e a fenda de entrada do detector.

Para valores da energia desde 200 eV abaixo até 1000 eV acima da energia da descontinuidade K do bromo (13473,7 eV) o detector terá que percorrer uma região $2\theta = 2{,}26°$. O intervalo em comprimentos de onda para o qual teremos que fazer leituras variará assim entre $\lambda_{min} = 0{,}8566$ Å e $\lambda_{max} = 0{,}9340$ Å. O elemento mais adequado para anticátodo será a prata cujos comprimentos de onda das riscas características variam entre 0,5638 Å e 0,4860 Å.

Para o estudo do espectro de EXAFS que se estende a seguir à descontinuidade K dum elemento de elevado número atómico, como por exemplo o índio (Z = 49), a montagem terá que sofrer algumas alterações: o cristal monocromador, que deverá ter também um poder reflector intenso, terá uma constante de rede menor porque o valor do ângulo de Bragg é agora menor também. Assim escolhemos um cristal de fluoreto de lítio (220) para o qual $2d = 2{,}848$ Å. Afim de se usar o goniómetro com o mesmo raio, 20cm, como neste caso o ângulo de Bragg é igual a 8,96° (calculo para a descontinuidade de absorção K do In em que o valor da anergia é igual a 27939,9 eV) o cristal deverá ser talhado com um raio $2R = 1300$mm e encurvado numa prensa de raio $R = 650$mm o que nos dará como anteriormente $\overline{AM} = \overline{MF} = 200$mm.

As dimensões da janela de entrada do monocromador (usando também a maior dimensão da mancha focal na vertical) serão agora 6mm de largura por 5mm de altura; a janela de saída deverá ter qualquer das duas dimensões ligeiramente superiores a 6mm.

Como neste caso o ânodo projectado tem a dimensão de 0,01x2mm, a dimensão da mancha sobre a fenda do detector é de 9mm e a sua divergência é de meio grau. Não se justifica também neste caso a montagem de uma fenda de Soller; se a dimensão e a posição da janela de entrada do detector o exigissem poderia usar-se uma fenda que limitasse em altura.

A fenda do detector deverá neste caso ter a largura de 0,01mm.

Para aumentar a intensidade de um espectro de EXAFS é possível introduzir ainda um melhoramento de acordo com (42) que consiste em tornar os colimadores e a caixa do monocromador estanques enchendo-os então de hélio. Evita-se assim a absorção pelo ar ao longo do trajecto do feixe. Uma hipótese menos dispendiosa seria fazer vácuo não permitindo que a pressão desça abaixo duns quinze a vinte milímetros de Hg. Esta limitação é sugerida por causa de se ter que manter rigorosamente a composição química da amostra durante a experiência, que se situa no trajecto do colimador entre o monocromador e a fenda de entrada do detector.

O anticátodo da ampola deverá ser de molibdénio uma vez que as riscas K características do anticátodo de prata, que têm comprimentos de onda compreendidos entre 0,5638 Å e 0,4860 Å, ficariam muito próximos do comprimento de onda $\lambda_{max} = 0{,}4453$ Å do espectro de EXAFS do índio. Uma estimativa feita a partir do cálculo da largura $\Delta\lambda$ do dublete K α da prata quando a tensão aplicada à ampola é da ordem de 35KV deu 0,09 Å para essa proximidade (os valores usados para este cálculo foram extraídos de (1)).

C. O Detector

A medição do coeficiente de absorção em função do valor da energia para espécimens concentrados pode fazer-se directamente medindo a atenuação do feixe incidente numa experiência de transmissão. Para este fim será adequado usar uma câmara de ionização, a não ser que a relação sinal — ruído seja pequena; então convirá usar antes um detector de cintilação, por exemplo para soluções aquosas concentradas.

Os detectores de cintilação são adequados para radiações de comprimento de onda compreendidos entre 0,2 e 2,5 Å. Têm uma resposta bastante linear e o seu tempo morto é da ordem dos décimos de microsegundo.

A eficiência de contagem destes detectores é elevada, particularmente para comprimentos de onda menores que 1 Å (é o nosso caso) o que reduz o tempo de acumulação de um número préfixado de impulsos para cada medida. O valor da capacidade do detector é da ordem dos 200 000 imp./s.

D. O Espécimen

Devem adoptar-se duas precauções importantes: conseguir um espécimen homogéneo e manter rigorosamente a sua composição química durante a experiência.

Se se trata dum sólido será reduzido a pó e pode introduzir-se entre duas fitas adesivas que o protegem da humidade. Se se trata dum líquido terá que ser introduzido numa célula dum material quimicamente inerte (em relação ao espécimen pelo menos) com duas janelas plano-paralelas duma substância pouco absorvente, por exemplo "kapton" ou colódio (6).

O espécimen pode ser colocado antes ou depois do monocromador. Se for colocado depois evita-se a possibilidade de se focarem os radiamentos de fluorescência que então se sobreporiam ao espectro de EXAFS.

E. Crítica

A resolução em energia da montagem pode obter-se a partir da expressão que dá o valor da energia E, em função do comprimento de onda λ, e da lei de Bragg

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{2\ d\ \text{sen}\ \theta} \qquad (3)$$

em que h designa, como habitualmente a constante de Planck e c a velocidade da luz

Calculando ΔE:

$$\Delta E = E\ \text{cotg}\ \theta\ \Delta\theta \qquad (4)$$

obtém-se, para valor mínimo do incremento $\Delta\theta$ da montagem, o valor do incremento que sofre o valor da energia duma observação para a imediatamente seguinte.

Para o espectro de EXAFS que se estende a seguir à descontinuidade de absorção K de um elemento de número atómico médio (Z = 35) obtém-se na montagem projectada

$$\Delta E = 7{,}2 \text{ eV}$$

e para um elemento de número atómico elevado (Z = 49) obtém-se

$$\Delta E = 8{,}9 \text{ eV}$$

Qualquer dos valores obtidos para a resolução nas duas montagens que projectamos é suficiente se atendermos a que a extensão espectral dos menores detalhes dum espectro de EXAFS é da ordem de 30 eV (cálculo feito para $\Delta k = 0{,}8$ Å^{-1} e para um valor médio de k, por exemplo para $k = 5$ Å^{-1}).

Se a resolução da montagem não fosse suficiente podia melhorar-se reduzindo a dimensão da fenda do detector e consequentemente a dimensão do foco da ampola (ou pelo menos o ângulo de saída desta); ou ainda aumentando a distância $\overline{AM} = \overline{MF}$. Qualquer destas duas hipóteses significaria porém uma melhor resolução à custa de uma menor intensidade.

Os elementos sugeridos para anticátodos nos dois projectos são diferentes. Caso não fosse fácil substituí-los poderia usar-se sempre o molibdénio.

Um detector de cintilação associado ao seu sistema electrónico permite normalmente rejeitar as harmónicas de ordem superior, mas se não dispuséssemos dum sistema de detecção com esta possibilidade o tipo de ampola proposta permitiria eliminá-las satisfatoriamente, dadas as suas características eléctricas.

Para o exemplo dado do bromo pode ver-se no quadro I os comprimentos de onda das harmónicas de 2.ª e 3.ª ordem. Se admitirmos que esses comprimentos de onda calculados são os valores a que corresponde a intensidade máxima do espectro contínuo, da expressão de (14)

$$\lambda_{I_{max}} = \frac{3}{2}\lambda_{min} \qquad (5)$$

podemos calcular os valores de λ_{min} e finalmente a lei de Duane e Hunt

$$eV = \frac{hc}{\lambda_{min}} \qquad (6)$$

permite-nos calcular os correspondentes valores da tensão a aplicar à ampola.

QUADRO 1

Confronto entre o valor do comprimento de onda λ (n) das harmónicas de ordem *n*, e os valores de λ_{min} do espectro contínuo para diversos valores da tensão V.

n	λ (n) (Å)	λ_{min} (Å)	V (kV)
1	0,92	0,61	20
2	0,46	0,31	40
3	0,31	0,20	62

A tensão deverá ser igual ou superior a 20 kV. Se quisermos ter a certeza que não é produzido radiamento correspondente à harmónica de segunda ordem o valor da tensão a aplicar à ampola deverá ser inferior a 26,95 kV a que corresponde um $\lambda_{min} = 0{,}46$ Å, que é o comprimento de onda da harmónica de 2.ª ordem. Como para o foco escolhido a potência máxima é de 10 kW, a corrente máxima que poderemos aplicar à ampola é de 300 mA para a tensão de 25 kV por exemplo.

4. A OBTENÇÃO DUM ESPECTRO DE EXAFS

A. A Medição das Energias

Numa experiência de EXAFS pretende medir-se o coeficiente de absorção dos raios X em função da energia do feixe incidente. Assim obtém-se um espectro de emissão, fig. 2a, para energias que vão desde cerca de -200 eV a +1000 eV em relação à descontinuidade de absorção do elemento da substância para a qual se pretende obter o espectro de EXAFS. Com o espécimen no trajecto do feixe obtém-se na mesma região um "espectro de transmissão", fig. 2b.

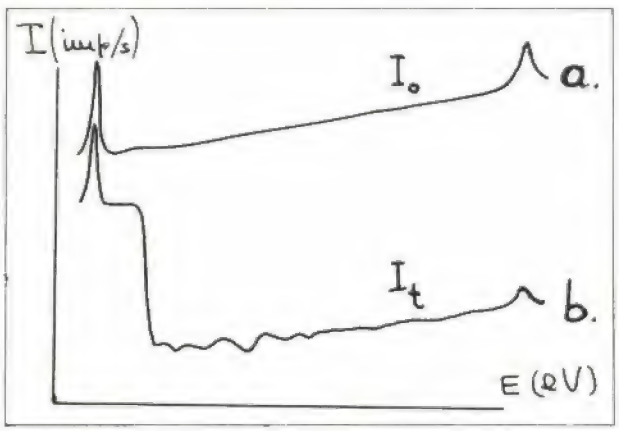


Fig.2 — Valores da intensidade, em imp./s, em função dos valores da energia, em eV, dos espectros que se obtêm quando o especímen está intercalado (I_t), e quando não está (I_o), no trajecto do feixe. Na região das baixas energias do espectro vê-se uma risca característica e na região das altas energias uma risca duma impureza do anticátodo.

O espectro de absorção obtém-se calculando pela lei de Lambert-Beer

$$ln \frac{I}{I_o} = \mu t \qquad (7)$$

em que t é a espessura do espécimen e I_t e I_o são respectivamente a intensidade que se obtém quando o espécimen está ou não intercalado no trajecto do feixe, fig. 3a.

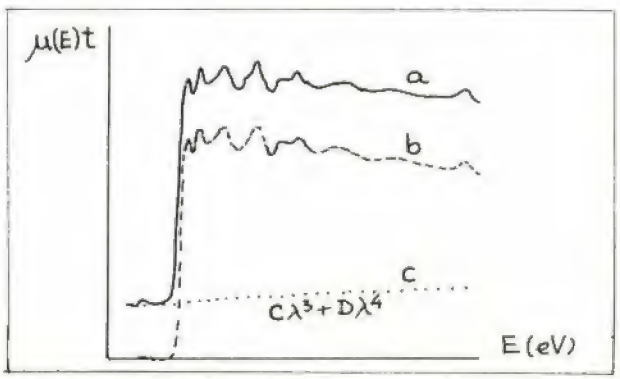


Fig.3 — Espectro de absorção μ (E) t

As experiências que nos permitem obter os espectros de emissão e de transmissão dão-nos os valores das intensidades para os valores duma certa gama do ângulo 2θ lidos no espectrómetro. para converter cada valor de θ_j em E_j utiliza-se a expressão de (11)

$$E_j = \frac{12398{,}52}{2\ d\ \text{sen}\ \theta_j} \qquad (8)$$

em que os valores da energia E_j são dados em eV.

Porém, para se obter os valores de E_j com a precisão necessária (distâncias interatómicas r com a precisão de 0,01 Å) a constante $2d$ a usar deverá ser, não a do fornecedor da lâmina cristalina, mas a que se obtém aferindo-a por meio duma risca característica do espectro. Este processo tem a virtude de evitar as correcções de temperatura ou de polarização de Lorentz.

Para os elementos bromo e índio os valores de θ_{inic} e θ_{fin} são os que figuram no quadro 2.

QUADRO 2

	θ_{inic}	θ_{fin}
Bromo	13,41°	12,28°
Índio	9,03°	8,71°

Por estes valores se vê que as descontinuidades K do bromo e do índio distam suficientemente entre si para os dois espectros de EXAFS se poderem obter sem sobreposição. Poder-se-á assim investigar separadamente os dois espectros de EXAFS para estes dois elementos numa solução aquosa de $InBr_3$.

Para uma banda de energia de 7,2 eV um incremento da ordem de 3,6 eV é adequado. Isso corresponde, no caso do bromo, a $\Delta 2\theta = 0{,}014°$ e a 333 leituras e no caso do índio a $\Delta 2\theta = 0{,}006°$ e a 300 leituras, uma vez que $\Delta E = 8{,}9$ eV. Estes incrementos não levantam dificuldades experimentais. Dum modo geral um goniómetro permite incrementos mínimos de $\Delta 2\theta = 0{,}001°$.

B. A Conversão da Escala das Energias numa Escola de Números de Onda

Para se poder extrair dos resultados experimentais da EXAFS as informações relativas à estrutura da matéria que se investiga é necessário conhecer o coeficiente de absorsão μ em função da grandeza k do vector número de ondas do fotoelectrão que é expulso do átomo perturbado. A função $\mu(k)$ obtém-se de $\mu(E)$ relacionando a expressão da energia cinética do fotoelectrão com a energética $h\nu$ do fotão de raios X incidente

$$\frac{h^2 k^2}{2m} = h\nu - E_o(k) = E - E_o(k) \qquad (9)$$

$$k = \left(\frac{2m\ |E - E_o(k)|}{\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad (10)$$

em que $E_0(k)$ é a energia de referência da descontinuidade de absorção.

A aplicação desta expressão tem a dificuldade de obter um valor de k com rigor, uma vez que o valor de E_0 é desconhecido. Rodeia-se esta dificuldade considerandoo um parâmetro de valor ajustável. Usa-se em geral um valor de E_0 para o qual a curva que representa a descontinuidade de absorção tem uma certa particularidade tal como um ponto de inflexão. Existem na literatura valores de E_0 calculados teoricamente para o Ni e o Nb (13).

C. A Determinação de χ (k)

Para se obter $\chi(k)$, partindo do coeficiente de absorção total $\mu(E)$, pode começar-se por subtrair a $\mu(E)\,t$ a função que se obtém extrapolando os valores do coeficiente de absorção correspondentes à região lentamente variável que fica à esquerda da descontinuidade de absorção, fig. 3c à qual ajustamos os coeficientes dum polinómio de Victoreen (11) $C\lambda^3 + D\lambda^4$. Obtém-se assim uma função $\mu_K(E)\,t$, fig. 3b, devida somente à camada K do elemento em questão.

Para determinar $\chi(k)$ precisamos ainda de conhecer o valor de $\mu_0(E)$, o coeficiente de absorção do átomo isolado, para o qual os cálculos teóricos não dão a precisão necessária, para os resultados que pretendemos obter (0,01%). Admitindo que os valores de $\mu_0(E)\,t$ coincidem com os que podem ser fornecidos a partir do declive suave da curva que representa $\mu_k(k)\,t$, a parte oscilatória restante é considerada $\Delta\mu = \mu_k(E) - \mu_0(E)$ e obtém-se assim

$$\chi(k) = \frac{\Delta\mu}{\mu_0} \qquad (11)$$

normado para uma escala referida a um átomo. Para esta segunda fase ajusta-se a $\mu_k(k)\,t$ um polimónio em k, fig. 4.

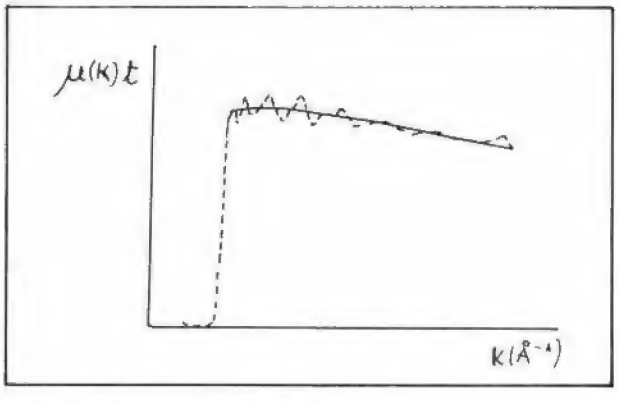


Fig.4 — Espectro de absorção μ_k (k) t

Este processo que se encontra bastante usado na literatura pode de acordo com (41) conter erros sistemáticos que se poderão evitar usando polinómios "Splines" ou "B Splines" (12 e 26).

Na fig. 5 pode ver-se representada uma função χ (k).

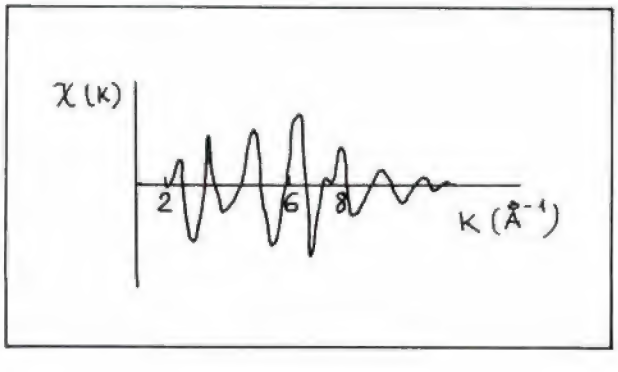


Fig.5 — Função χ (k) obtida experimentalmente.

5. DETERMINAÇÃO DAS DISTÂNCIAS INTERATÓMICAS

A transformação de Fourier da função χ (k) permite obter as distâncias interatómicas.

A distância do átomo central aos átomos vizinhos mais próximos pode no entanto determinar-se por um método gráfico simples (23). Este método admite que a difusão devida à primeira camada predomina na função χ (k). Assim, considerando apenas a ondulação principal, o período da função *seno* corresponderá ao da primeira camada de coordenação. A análise depende pois da variação da função

$$\text{sen}\ [2k\ r_j + 2\ \psi_j\ (k)]$$

Se $\psi_j\,(k)$ varia linearmente com k

$$\psi_j\,(k) = -\alpha_j\ k + \beta_j \qquad (12)$$

Substituindo no argumento da função *seno*, obtém-se para a primeira camada

$$2k\,(r_1 - \alpha_1) + 2\beta_1 = \frac{1}{2}\,n\,\pi \qquad (13)$$

em que n = 0,2,4,... para os máximos da função χ (k) e n = 1,3,5,... para os mínimos. Um gráfico de n em função dos valores de k para os quais a função χ (k) é máxima ou mínima permite obter $r_1 - \alpha_1$ (do coeficiente angular da recta) e β_1 (da ordenada para k = 0)

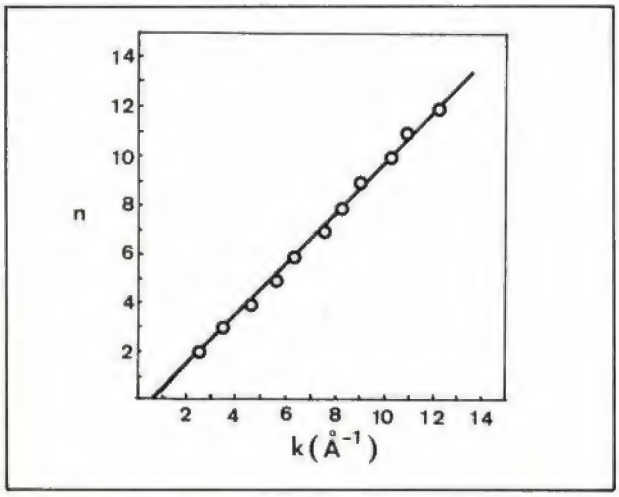


Fig.6 — Valores de n, da expressão (13), para os diferentes valores de k do argumento do *seno* (expressão (11)) em que é máxima ou mínima a função χ (k).

Utilizando este método para uma substância em que r_1 é conhecido determina-se o valor de α_1. Para uma substância de composição química semelhante, em que r_1 é desconhecido, usando o mesmo valor de α_1 pode obter-se a distância interatómica.

A análise de Fourier da função χ (k) pode fazer-se, em primeiro lugar, por meio do módulo da transformada complexa desta função.

A transformada de Fourier de $k^n \chi$ (k) no espaço dos r é dada por

$$F\,(r) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \int_{k_{min}}^{k_{max}} k^n\ \chi\,(k)\ W\,(k)\ e^{\,2ikr}\ dk \qquad (14)$$

O factor k^n destina-se a compensar o facto de a amplitude do espectro de EXAFS se reduzir quando o valor de k cresce. Para uma região de k entre 4 e 15 Å^{-1} os valores de n recomendados em função do número atómico dos atómos rectrodifusores figuram no quadro 3.

QUADRO 3

Valores de n usadas para expoente de k, na inversão de Fourier de χ (k), relativos a diversos elementos, de número atómico Z.

Elementos de número atómico Z	Valores de n
Z < 36	3
36 < Z < 57	2
57 < Z < 86	1

Nas fig. 7 e 8 pode observar-se o efeito de multiplicar χ (k) por k^n para o caso de um espectro de EXAFS do germânio (Z = 32). As amplitudes que se observam na fig. 8 são obviamente mais uniformes que as que se observam na fig. 7, antes de χ (k) ter sido multiplicado por k^3. O efeito de multiplicar por k^3 começa a fazer-se sentir a partir de k = 4 Å^{-1} que corresponde à energia dum fotoelectrão de cerca de 60 eV acima da descontinuidade de absorção.

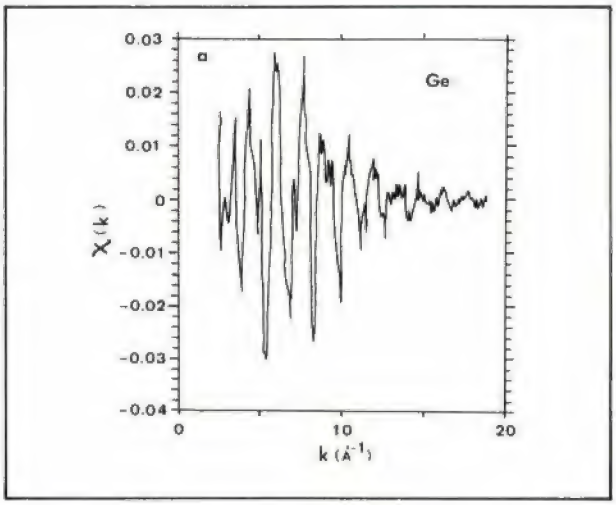


Fig.7 — Andamento da função χ (k) tal como é obtida da experiência.

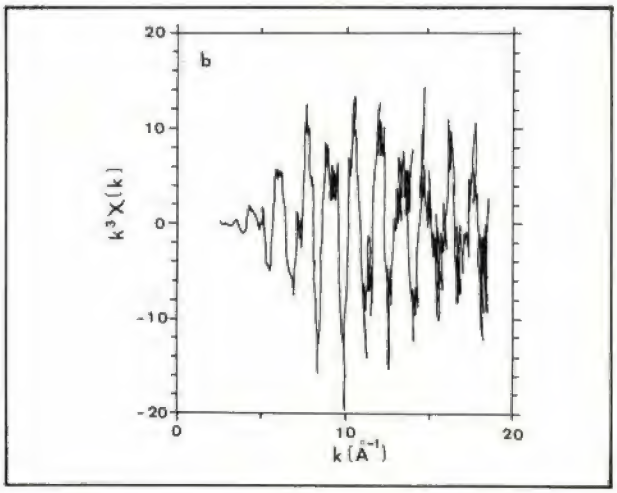


Fig.8 — Andamento da função k^3 χ (k) em que χ (k) está representada na fig. 7.

Na expressão (14), W (k) é uma função com o perfil de Gauss, que tem o valor 0,1 em k_{min} e em k_{max} (3).

O módulo da transformada de Fourier complexa da função $k^n \chi(k) W(k)$ a que chamaremos "função de estrutura" é uma função radial do tipo da que representamos na fig. 9. Desta função obtêm-se as distâncias do átomo central aos átomos das diferentes camadas que o rodeiam.

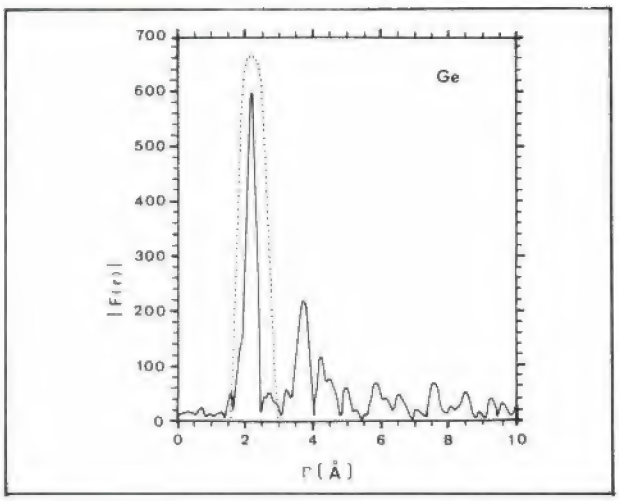


Fig.9 — Módulo |F (r)| da transformada complexa da função χ (k). A tracejado está representada uma função "janela", J(r).

O primeiro máximo importante corresponde à contribuição da primeira camada em torno do átomo absorvente. Outros máximos de menor grandeza, acima do fundo, correspondem a camadas de vizinhos mais distantes.

A análise de Fourier da função $\chi(k)$ pode ser refinada da seguinte maneira: faz-se a transformada de Fourier inversa para cada máximo da função de estrutura separadamente. Para isto "filtra-se" a função de estrutura por meio duma função "janela" $J(r)$ que dá realce aos valores numéricos da função no intervalo em que se situa esse máximo, multiplicando-os por um factor que só tem valores apreciáveis nesse mesmo intervalo. A função assim obtida, no espaço de k, tem que ser corrigida (5) por ter sido obtida por filtragem. O espectro finalmente obtido, $\chi'(k)$ corresponde à contribuição da referida camada de átomos vizinhos para o espectro de EXAFS. De $\chi'(k)$ pode derivar-se a função amplitude.

$$A_j(k) = \frac{N_j}{k\, r_j^2} \, | f_j(k, \pi) | \; e^{-2\sigma_j^2 k^2} \, e^{-\frac{2 r_j}{\lambda}} \qquad (15)$$

$$\varnothing_j (r_j, k) = 2k\, r_j(k) + 2\delta'_l(k) + \varnothing(k) \qquad (16)$$

pelo processo descrito em (41).

O valor da distância interatómica é dado então por

$$r_j(k) = \frac{\varnothing_j(r_j, k) - 2\delta'_l(k) - \varnothing(k)}{2k} \qquad (17)$$

Esta expressão não dá para $r_j(k)$ um valor independente de k devido às incertezas experimentais, às incorrecções cometidas na atribuição teórica dos valores às diferenças de fase, ou na escolha dos valores de E_0. Em 8 Å^{-1} podem obter-se valores de r com um erro de ± 0,05 Å. Um melhor ajuste de E_0 permite atingir um erro apenas de ± 0,01 Å. Estes valores foram obtidos por Martens et al (33) para compostos de Cu.

A. As Diferenças de Fase

Como vimos, para determinar as distâncias interatómicas interessa conhecer as diferenças de fase.

As diferenças de fase podem obter-se por determinações empíricas ou por cálculos baseados em considerações teóricas. No primeiro caso obtém-se apenas a diferença de fase total ψ (k). No segundo são calculadas separadamente a diferença de fase do átomo central, $\delta'_l(k)$, e a diferença de fase da onda rectrodifundida, $\varnothing(k)$.

Os valores obtidos teoricamente encontram-se tabelados por B.K. Teo e P.A. Lee (35) para grande parte dos elementos do quadro periódico e é possível obter por interpolação

QUADRO 4

Valores das diferenças de fase do átomo central $\delta'_l(k)$ e da onda rectrodifundida $\varnothing$(k) para diversos elementos (valores calculados para k = 5, 1967 A)

	δ'_l (k) (rad)	$\varnothing$ (k) (rad)
O	-7,1700	0,1858
Br	2,6538	5,9716
In	6,3803	6,6205

valores das diferenças de fase para átomos que não figuram nas tabelas. No quadro 4 figuram os valores obtidos directamente, ou por interpolação, para o oxigénio, bromo e índio.

Na fig. 10 pode observar-se a diferença de fase introduzida pelo átomo central para o iodo, bromo, cloro e fluor, e na fig. 11 a diferença de fase correspondente à onda rectrodifundida para os mesmos elementos.

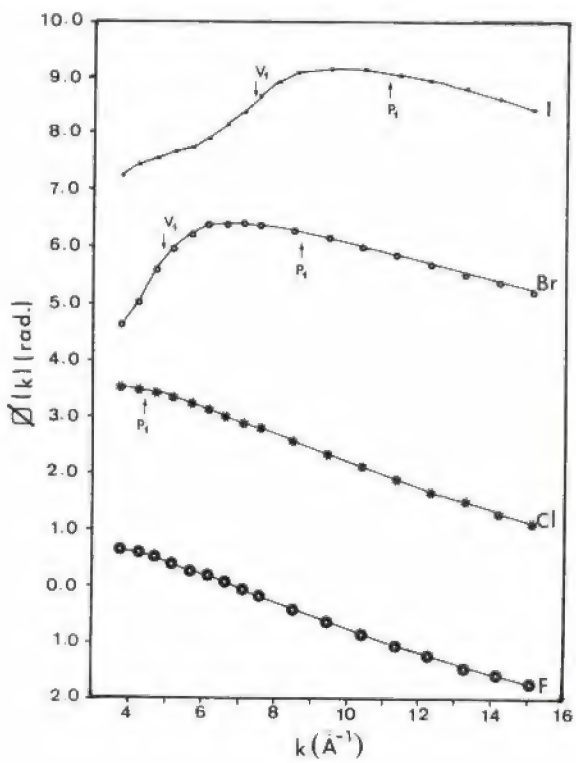


Fig.10 — Dependência relativamente a k da função de fase do átomo central (absorvente), δ'_l (k), para diversos elementos (I, Br, Cl e F).

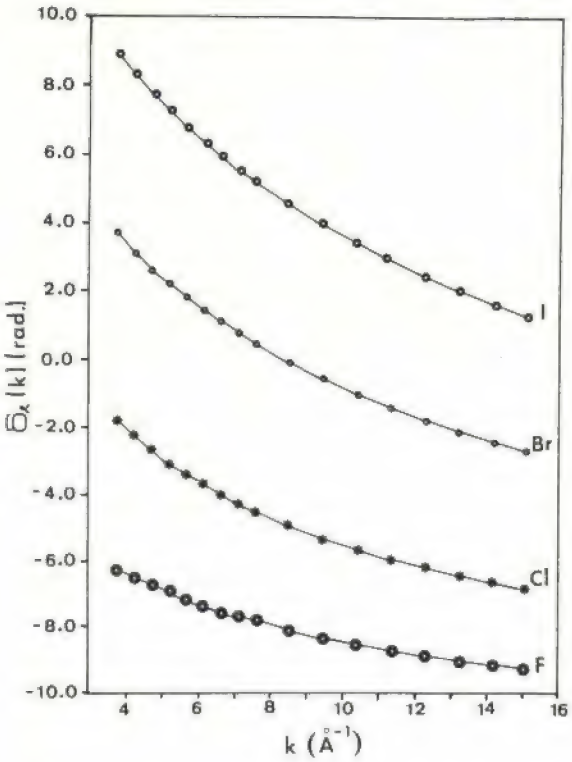


Fig.11 — Dependência relativamente a k da função de fase rectrodifundida, ϕ (k), para diversos elementos, (I, Br, Cl e F).

As determinações empíricas baseiam-se numa hipótese chamada de transferibilidade química. Esta hipótese é válida porque para energias cinéticas suficientemente elevadas, acima de 50 eV (onde o processo de EXAFS é dominado pelos electrões mais internos) as diferenças de fase são insensíveis às modificações da estrutura interatómica. Assim, para um cristal, de referência, podemos extrair o valor de ψ (k) e utilizá-lo para o mesmo par de átomos num sistema em que ψ (k) é desconhecido (por exemplo para uma solução aquosa). A validade deste processo pode demonstrar-se comparando o valor duma distância interatómica conhecida com a obtida com base nesta hipótese.

Separadas as contribuições da fase $\varnothing_c(k)$, relativa a uma substância conhecida, pelo processo descrito em (41) obtém-se

$$\varnothing_c\,(k) = 2k\ r_c + \psi_c\,(k) \qquad (18)$$

Separando da mesma maneira a fase $\varnothing_d$ (k) para a substância a investigar, e subtraindo membro a membro, obtém-se

$$\varnothing_d\,(k) - \varnothing_c\,(k) \approx 2k\,(r_d - r_c) \qquad (19)$$

Do coeficiente angular da recta obtém-se r_d.

B. A Amplitude da Onda Rectrodifundida

A amplitude da onda rectrodifundida pode determinar-se teórica ou experimentalmente, neste último caso fazendo intervir a hipótese de transferibilidade (entre um sistema conhecido e um desconhecido).

Os valores calculados satisfazem qualitativamente, mas quantitativamente por vezes sobrestimam a amplitude.

Dois tipos de circunstâncias da difusão inelástica ocorrem quando se dá o fenómeno de EXAFS que conduzem a uma redução da amplitude relativamente ao valor calculado teoricamente. As do primeiro tipo são excitações múltiplas no átomo central pois o excesso de energia $E-E_0$ no processo de fotoionização pode excitar outros electrões mais fracamente ligados. Em geral estas excitações múltiplas têm um espectro largo que tende a desvanecer o espectro de EXAFS. As do segundo tipo são situações de falta de coerência da onda rectrodifundida pelos átomos vizinhos relativamente à onda que parte do átomo central por ser obviamente finita a vida média do estado excitado: uma vez que o fenómeno de EXAFS resulta da interferência junto do núcleo da onda de matéria associada ao fotoelectrão, que parte do átomo central, com a onda de matéria rectrodifundida pelos átomos vizinhos, se o estado excitado do átomo central declinar antes do tempo de trânsito, a função de onda perde coerência e não se dá interferência. O termo

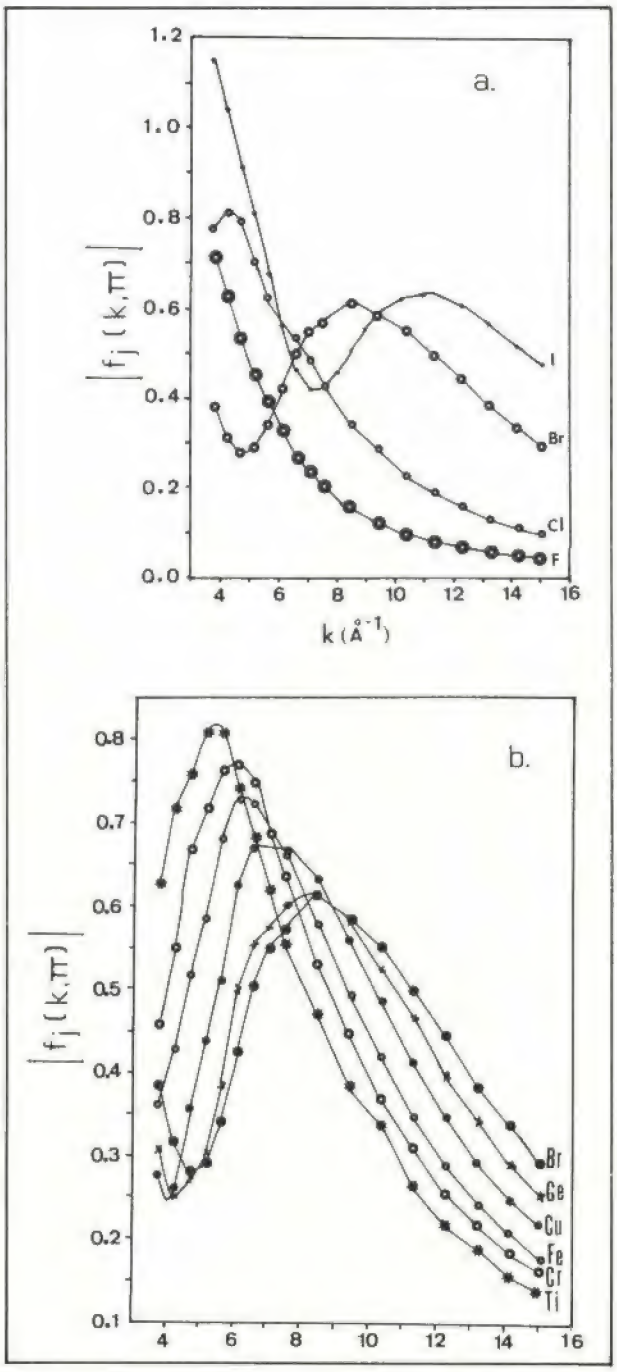


Fig.12 — Dependência relativamente a k da função amplitude rectrodifundida, $|f_j(k, \pi)|$, para diversos elementos: a. F, Cl, Br e I; b. Br, Ge, Cu, Fe, Cr e Ti.

do livre percurso médio λ na equação de $\chi(k)$ dá conta deste efeito de tempo de vida.

Ora as amplitudes da onda rectrodifundida tabeladas por B.K. Teo e P.A. Lee (35) têm em conta esta falta de coerência entre as funções de onda mas não têm em conta a multiplicidade de excitações, o efeito a muitos corpos, dos electrões mais exteriores do átomo central.

Um processo de corrigir o valor da amplitude consiste em introduzir na expressão de $\chi(k)$ um factor $S(k)$ que é aproximadamente igual a 1 para os baixos valores de k e varia entre 0,6 e 0,8 para valores de $k \leqslant 7$ Å^{-1}.

QUADRO 5

Valores da amplitude da onda rectrodifundida $|f_j\, k, \pi)|$ para diversos elementos. (Valores calculados para $k = 3{,}7795$ Å)

	Z	$f_j(k, \pi)$
O	8	0,7041
Br	35	0,3836
In	49	1,0478

Na fig. 12 estão representadas funções amplitude $|f_j(k, \pi)|$ para o bromo e para outros elementos.

No quadro 5 podem ler-se os valores da amplitude da onda rectrodifundida para o oxigénio, o bromo e o índio tabelado por B.K. Teo e P.A. Lee que como já referimos incluem o factor $\exp\left(-\frac{2r_j}{\lambda_j(k)}\right)$ da expressão de $\chi(k)$. Torna-se assim desnecessário o cálculo de λ pelo processo descrito por exemplo por Stern et al. (23) ou mais recentemente por B. Lengeler e P. Eisenberger (37), que propõem um método para determinar os factores de perdas inelásticas para cada camada e para cada par de átomos absorvente-rectrodifusor a partir de compostos de referência de estrutura conhecida.

C. O Número de Átomos Vizinhos

A função amplitude obtida da transformada de Fourier inversa, "filtrada" para cada camada, contém informação sobre o número de vizinhos dessa camada em torno do átomo central. Para se obter o valor de N_j admite-se uma hipótese de transferibilidade química para a amplitude, pelo que é necessário dispor dum sistema de referência em que N_j seja conhecido.

Da expressão (1), considerando a amplitude para uma só camada

$$A(k) = \frac{N}{kr^2}\, |f(k, \pi)|\, e^{-2k^2\sigma^2}\, e^{\frac{2r}{\lambda(k)}} \qquad (20)$$

e calculando o logaritmo da razão das amplitudes para os dois sistemas, obtém-se

$$ln\left(\frac{A_c(k)}{A_d(k)}\right) = ln\left(\frac{N_c\, r_d^2}{N_d\, r_c^2}\right) + 2k^2(\sigma_d^2 - \sigma_c^2)$$

$$+ 2\left(\frac{r_d}{\lambda_d(k)} - \frac{r_c}{\lambda_c(k)}\right) \qquad (21)$$

Admite-se que $\lambda_d(k) \approx \lambda_c(k)$ e que $(r_d - r_c) << \lambda(k)$, nestas condições o terceiro termo é despresável. Da representação gráfica do primeiro membro da expressão (21) em função de k^2, pode obter-se o valor de N_D e σ_d depois de obtido r_d por um dos processos descritos atrás.

Ao contrário do que se passa com a transferibilidade das diferenças de fase, a transferibilidade da amplitude pode ser afectada por vários factos. Esses factos podem ser a má determinação empírica de $A(k)$, se a gama de valores de k de que dispomos for pouco extensa, ou a circunstância da relação sinal ruído poder ser pequena, ou ainda a incerteza na determinação dos factores de perdas inelásticas como foi referido em 5.B.

O facto de a transformada de Fourier ser filtrada introduz uma distorção na amplitude. Uma correcção a esta distorção faz-se usando o valor teórico da amplitude para calcular $\chi(k)$ que será analisado da mesma forma exactamente que a função $\chi(k)$ obtida experimentalmente, e comparando as duas, variando da mesma forma os valores limites dos kk nas duas funções (a experimental e a teórica).

Para a primeira camada de átomos vizinhos em torno do átomo central é possível no entanto obter valores de N_j com um erro inferior a $\pm$ 10%.

A análise dum espectro de EXAFS dá-nos além dos valores das distâncias interatómicas, informação sobre o número de coordenação e ainda sobre um terceiro parâmetro, difícil de obter doutra forma, o coeficiente de Debye-Waller, σ, que é uma importante característica da estrutura dum sistema.

6. VANTAGENS DE EXAFS EM RELAÇÃO A OUTRAS TÉCNICAS DE INVESTIGAÇÃO DE ESTRUTURAS MOLECULARES

As técnicas de difracção, dos raios X ou dos neutrões, aplicadas a substâncias que apresentam uma ordem extensa, como os cristais, dão uma informação tridimensional da sua estrutura; porém, aplicadas a substâncias que têm apenas uma ordem local, como é o caso dos líquidos e dos sólidos amorfos, a informação estrutural é apenas a uma dimensão. Com efeito, a transformada de Fourier da intensidade de uma figura de difracção dá uma função de distribuição radial a uma dimensão, que para cada distância dá todas as correlações que no espécimen ocorrem a essa distância, sejam quais forem os pares de partículas que lhes dão lugar, enquanto que a técnica de EXAFS fornece uma informação selectiva, isto é, para cada espécie de átomo separadamente — desde que se observem sucessivamente as regiões espectrais em que se situam as descontinuidades de absorção dos diversos tipos de átomos do espécimen. Tal informação, o número e a espécie de átomos vizinhos e as suas distâncias ao átomo absorvente, está contida numa função de distribuição radial a uma dimensão, centrada no átomo absorvente.

Embora a difracção dos raios X ou a ressonância magnética nuclear dêem maior precisão para determinar números de coordenação, a EXAFS permite obter na determinação das distâncias entre um átomo ou um ião e as suas primeiras camadas de coordenação um rigor de 0,01 Å. O acordo entre os resultados (distâncias interatómicas) obtidas pela difracção dos raios X e por meio de EXAFS é bom para os cristais e difere de 2% nos líquidos. A discrepância provém de ser diferente a região do espaço dos momentos k: na difracção dos raios X o parâmetro de difracção k varia entre 1 e 18 Å^{-1} enquanto que em EXAFS 6 Å^{-1} < $2k$ < 22 Å.

Além do que atrás se disse, um aspecto notável em EXAFS é ser possível conhecer a espécie de átomo coordenado pelo átomo central (pelo átomo em torno do qual estamos a estudar a estrutura) e se a camada de coordenação for constituída por duas espécies de átomos diferentes, poder distingui-los. Isto é possível através do perfil da amplitude da onda rectrodifundida (obtida por transformada de Fourier inversa, filtrada para uma camada) sobretudo se o número atómico Z dessas duas espécies de átomo for bastante diferente ($\Delta Z > 4$).

A espectroscopia de EXAFS é de facto uma técnica privilegiada para o estudo da estrutura molecular de líquidos, de polímeros, de semicondutores, de substâncias não cristalinas que interessam não só aos domínios da Física e da Química mas também à Biologia.

Agradece-se à American Physical Society ter autorizado a reprodução das figuras 2, 3, 4 e 5 da Physsical Review B, 17 (1978) 1481 e das figuras 7, 8 e 9 da Reviews of Modern Physics, 53 (1981) 769.

As figuras 10, 11, 12a e 12b foram reproduzidas com autorização da revista Journal of the American Chemical Society 101 (1979) 2815, copyright (1979) American Chemical Society.

Este artigo foi redigido com base no projecto de investigação que a autora apresentou em Setembro de 1983 à Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa para prova complementar do doutoramento em Física. O tema do projecto foi escolhido pela autora de entre alguns que o Professor M. Alves Marques lhe propôs.

BIBLIOGRAFIA

(1) International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology, vol VI, pg. 33, ed. E.W. Washburn (Macgraw-Hill, 1928).
(2) W.M. Dumond and P. Kirkpatrick, Rev. Sci. Instr. 1 (1930) 88 citado em "X-Rays in Theory and Experiment" A. Compton & S. K. Allison, pág. 750.
(3) W.L. Bragg and J. West, Phil, Mag. 10 (1930) 823 citado por (5)
(4) T. Johansson, Naturw. 20 (1932) 758.
(5) J. Waser and V. Schomaker, Rev. Mod. Phys. 25 (1953) 671.
(6) F. Debot, Physica 21 (1955) 605.
(7) F.W. Lytle, Phys. Non-Cryst. Sol. (1965) 12 ed. J.A. Prins (North Holland, Amsterdam).
(8) F.W. Lytle, Advances in X-ray Analysis, 9 (1966) 398, ed. G.R. Mallet, M. Fay, and W.M. Mueller (Plenum, N-Y).
(9) J.A. Bearden, Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 78.
(10) J.A. Bearden and A.F. Burr, Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 125.
(11) International Tables for X-ray Crystallography, ed. K. Lonsdale (Kynoch Press) 1968 vol III.
(12) C. de Boor, J. Approx. Th. 1 (1968) 219 e 6 (1972) 50 citado por (41).
(13) J.B. Pendry, J. Phys. C. 2 (1969) 1215.
(14) L. Salgueiro e J.G. Ferreira, "Introdução à Física Atómica e Nuclear", vol I, pág. 197, (1970).
(15) D.E. Sayers, F.W. Lytle and E.A. Stern, Advances in X-ray Analysis, 13 (1970) 248, ed. B.L. Henke, J.B. Newkirk and G.R. Mallet (Plenum, N-Y).
(16) D.E. Sayers, E.A. Stern and F.W. Lytle, Phys. Rev. Letters. 27 (1971) 1204.
(17) D.E. Sayers, F.W. Lytle and E.A. Stern, J. Non-Cryst. Sol. 8-10 (1972) 401.
(18) E.A. Stern and D.E. Sayers, Phys. Rev. Letters 30 (1973) 174.
(19) E.A. Stern, Phys. Rev. B 10 (1974) 3027.
(20) F.W. Lytle, D.E. Sayers and E.A. Stern, Phys, Rev. B 11 (1975) 4825.
(21) P.A. Lee and J.B. Pendry, Phys. Rev. B 11 (1975) 2795.
(22) C.A. Ashley and S. Doniach, Phys. Rev. B 11 (1975) 1279.
(23) E.A. Stern, D.E. Sayers and F.W. Lytle, Phys. Rev. B 11 (1975) 4836.
(24) B.M. Kinkaid and P. Eisenberger, Phys. Rev. Letters 34 (1975) 1361.
(25) P. Eisenberger and B.M. Kinkaid, Chem. Phys. Letters 36 (1975) 134.
(26) P.A. Fox, A.D. Hall and N.L. Schryer, Bell Laboratories Computing Science Technical Report n.{ 47 (1976) citado por (41).
(27) G.S. Brown, P. Eisenberger and P. Schmidt, Solid State Com. 24 (1977) 201.
(28) P.A. Lee and G. Beni, Phys. Rev. B 15 (1977) 2862.
(29) D.R. Sandstrom and H.W. Dodgen, J.Chem. Phys. 67 (1977) 473.
(30) E.A. Stern, Cont. Phys. 19 (1978) 289.
(31) P. Eisenberger and B.M. Kinkaid, Science 200 (1978) 1441.
(32) P.H. Citrin, P. Eisenberger and R.C. Hewitt, Phys. Rev. Letters 41 (1978) 309.
(33) G. Martens, P. Rabe, N. Schwentner and A. Werner, Phys. Rev. B 17 (1978) 1481.
(34) A. Fontaine, P. Lagarde and D. Raoux, Phys. Rev. Letters, 41 (1978) 504.
(35) B.K. Teo and P.A. Lee, Am. Chem. Soc. 101 (1979) 2815.
(36) D.R. Sandstrom, J. Chem. Phys. 71 (1979) 2381.
(37) B. Lengeler and P. Eisenberger, Phys. Rev. B 21 (1980) 4507.
(38) E.A. Stern, B.A. Bunker and S.M. Heald, Phys. Rev. B 21 (1980) 5521.
(39) P. Eisenberger and B. Lengeler, Phys. Rev. B 22 (1980) 3551.
(40) P. Lagarde, A. Fontaine, D. Raoux, A. Sadoc and P. Migliardo, J. Chem. Phys. 72 (1980) 3061.
(41) P.A. Lee, P.H. Citrin, P. Eisenberger and B.M. Kinkaid, Rev. Mod. Phys. 53 (1981) 769.
(42) W. Thulke, R. Haensel, and P. Rabe, em "EXAFS and Near Edge Structure" — Proceedings of the International Conference, Frascati — Italy, 13-17 de Setembro 1982 (Springer — Verlag, 1983).
(43) G. Licheri, G. Pinna and G. Navarra Z. Naturf. 38 (1983) 559.
(44) G. Licheri, G. Paschina, G. Piccaluga and G. Pinna, J. Chem. Phys. 79 (1983) 2168.

A GENERALIZED INTEGRAL CHARGE RELATION FOR BIPOLAR DEVICES

P.L. BORGES TEIXEIRA

Centro de Electrónica Aplicada (INIC) e Dept. Eng. Elect. Instituto Superior Técnico

RESUMO

Apresenta-se uma generalização original da relação de Gummel, que faz intervir a condução ambipolar em todas as regiões do dispositivo. Com base nesta relação, propõe-se um modelo de carga integral generalizado, que se compara com as relações de Gummel e Poon. Obtêm-se conclusões teóricas sobre a injecção em alto nível, e sobre a simetria da corrente de transporte.

ABSTRACT

A generalized, new version of the Gummel relation is presented. Ambipolar conduction is assumed in all transistor regions. A generalized integral charge model is proposed, and compared with the Gummel and Poon relations. Theoretical conclusions on the high-level injection and symmetry of transport current are derived.

INTRODUCTION

In a classical paper [1], Gummel presented an integral charge relation which shortly became a valuable tool for the one-dimensional modelling of bipolar devices [2], [3]. However, the low-level approximations made in deriving that relation do not generally apply to normal, high-level operation of bipolar power transistors. The aim of this paper is to briefly describe a new generalized integral charge relation where no such assumptions are introduced *ab initio*.

BASE REGION

The problem is restricted to one-dimensional, x directed planar current flow under static conditions. We shall assume the following approximations which by no means are restrictive to low-level operation: macroscopic formulation of transport equations; no degenerate concentrations, i. e. the Einstein-Nernst relation is valid, and bandgap narrowing effects are neglected; contact surfaces are in equilibrium; quasi-neutrality of intermediate regions. Considering an ambipolar current flow, we may derive from the basic transport equations the following general relation

$$\left| \frac{p(x)\ n(x)}{n_i^2} \right|_{x_1}^{x_2} = \int_{x_1}^{x_2} \frac{J_n(x)}{q\ D_n(x)\ n_i^2}\ p(x)\ dx - \int_{x_1}^{x_2} \frac{J_p(x)}{q\ D_p(x)\ n_i^2}\ n(x)\ dx \qquad (1)$$

where the symbols in the above equation have their usual meaning, and x_1 and x_2 are any two values of x inside the semiconductor structure. We shall first apply this relation to the base quasi-neutral region $(0,W_B)$ of a NPN transistor. Introducing the charge densities

$$\tilde{Q}_{pB} \triangleq \int_0^{W_B} q\ p(x)\ dx$$

$$\tilde{Q}_{nB} \triangleq \int_0^{W_B} q\ n(x)\ dx \qquad (2)$$

and making use of the continuity equations, we obtain, after some involved calculations, for the electron current at the BC boundary plane

$$J_n(W_B) = q^2 \overline{D_{nB}} n_{iB}^2 \left[\frac{(pn/n_i^2)_{W_B} - (pn/n_i^2)_0}{\tilde{Q}_{pB}} \right] + J_p(W_B)\ b \frac{\tilde{Q}_{nB}}{\tilde{Q}_{pB}} + R_B(W_B) \qquad (3)$$

Original recebido para publicação em 30/1/81.

Here $R_B(W_B)$ stands for an ambipolar recombination current, and $b = \bar{\mu}_n/\bar{\mu}_p$. Is is also possible to derive the electron current at the EB boundary, which is given by

$$J_n(0) = q^2\overline{D_{nB}}n_{iB}^2\left[\frac{(pn/n_i^2)_{W_B} - (pn/n_i^2)_0}{\tilde{Q}_{pB}}\right] + J_p(0)\, b\,\frac{\tilde{Q}_{nB}}{\tilde{Q}_{pB}} + R_B(0) \qquad (4)$$

Equations (3) and (4) are integral charge relations that describe the ambipolar current flow through the base. Hole currents $J_p(W_B)$ and $J_p(0)$ are injection components respectively into the collector and the emitter. They both express boundary conditions which depend on the charge transport on those regions. It can be shown that recombination currents R_B are composed of two terms. One is essentially independent of the injection level, and the other, proportional to $(b\tilde{Q}_{nB}/\tilde{Q}_{pB})$ is only important under high-level conditions. The component $J_p(W_B) \cdot (b\tilde{Q}_{nB}/\tilde{Q}_{pB})$ in eq. (3), or its counterpart in eq. (4), has the physical meaning of an electron (minority) drift current due to the electric field produced by the hole (majority) current. The transport currents retain their usual signification.

EMITTER REGION

This region extends from $x = -W_E$ (contact) to $x = -W'_E$ (EB junction). Integrating (1) between these limits, we obtain after some manipulations

$$-J_p(-W_E) = q^2\overline{D_{pE}}n_{iE}\left[\frac{(pn/n_i^2)_{-W'_E} - 1}{\tilde{Q}_{nE}}\right] - J_n(-W'_E)\,\frac{\tilde{Q}_{pE}}{b\tilde{Q}_{nE}} + R_E \qquad (5)$$

where

$$\tilde{Q}_{nE} \triangleq \int_{-W_E}^{-W'_E} qn(x)\,dx \;;\; \tilde{Q}'_E \triangleq \int_{-W_E}^{-W'_E} q\left[n(x) - n_o(x)\right]dx \;;$$

$$\tilde{Q}_{pE} \triangleq \int_{-W_E}^{-W'_E} qp(x)\,dx \qquad (6)$$

COLLECTOR REGION

This region extends from $x = W'_C$ to $x = W_C$ defined by the equilibrium condition $p(W_C) \cdot n(W_C) = n_i^2$. The dependency $W_C(J_C, V_{CE})$ is mainly required at the quasi-saturation. We shall assume W_C as constant. Integrating (1) between the above limits, we obtain

$$J_p(W'_C) = \frac{(pn/n_{ic}^2)_{W'_C} - 1}{\tilde{Q}_{nC}}\, q^2\,\overline{D_{pC}}n_{iC}^2 + \frac{\tilde{Q}_{pC}}{b\tilde{Q}_{nC}}\,J_n(W'_C) - R_C \qquad (7)$$

where

$$\tilde{Q}_{nC} \triangleq \int_{W'_C}^{W_C} qn(x)dx \;;\; \tilde{Q}'_C \triangleq \int_{W'_C}^{W_C} q\left[n(x) - n_o(x)\right]dx \;;$$

$$\tilde{Q}_{pC} \triangleq \int_{W'_C}^{W_C} qp(x)dx \qquad (8)$$

GENERALIZED CHARGE-CONTROL EQUATIONS

In order to link the current boundary conditions (3), (4), (5) and (7), the transition regions across EB and BC junctions are taken as in quasi-equilibrium, and recombination neglected. We may thus write

$$J_{n,p}(-W'_E) = J_{n,p}(0) \;;\; J_{n,p}(W'_C) = J_{n,p}(W_B) \qquad (9)$$

Eliminating $J_p(W_B)$ and $J_p(0)$ from the above mentioned system, the x directed emitter current $J_{Ex} = -J_T(-W_E)$ and collector $J_{Cx} = J_T(W_C)$ current are given by

$$J_{Ex} = \frac{1}{1-\delta_E\delta_B}\left\{-\left[(1+\delta_E)J_{BI} + (1+\delta_B)J_{EI}\right]\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_0 + (1+\delta_E)J_{BI}\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_{WB} + J'_{REx}\right. \qquad (10)$$

$$J_{Cx} = \frac{1}{1-\delta_C\delta_B}\left\{\left[(1+\delta_C)J_{BI} + (1+\delta_B)J_{CI}\right]\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_{WB} - (1+\delta_C)J_{BI}\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_0 + J'_{RCx}\right. \qquad (11)$$

Here J_{EI}, J_{BI}, and J_{CI} are reference currents, J'_{REx} and J'_{RCx} indicate a condensation of recombination terms, and the coefficients

$$\delta_E \stackrel{\Delta}{=} \frac{\tilde{Q}_{pE}}{b\tilde{Q}_{nE}} \; ; \; \delta_B \stackrel{\Delta}{=} \frac{b\tilde{Q}_{nB}}{\tilde{Q}_{pB}} \; ; \; \delta_C \stackrel{\Delta}{=} \frac{\tilde{Q}_{pB}}{b\tilde{Q}_{nC}} \tag{12}$$

provide an indication of the high-level injection into the regions they refer. Let us consider the $(1-\delta_E\delta_B)^{-1}$ factor of J_{Ex}, and suppose that δ_E and δ_B may simultaneously assume finite, non-zero values. The result $\delta_E\delta_B = 1$ may then well take place, and thus $J_{Ex}\rightarrow\infty$. This is absurd, and reveals an inconsistency at equation (10). We thereby conclude that high-level injection (as described by δ_E, δ_B, or δ_C) can only occur into the region with lower impurity concentration. For the forward-biased EB junction, we thus have $\delta_E \ll \delta_B$. The above conclusion may be extended to the $(1-\delta_B\delta_C)^{-1}$ factor of J_{Cx}.

To make use of (10) and (11) on device modelling, it is convenient to normalize charges $\tilde{Q}_{p,n}$ to some reference of equilibrium values $(\tilde{Q}_{p,n})_o$. The normalized, dimensionless charges may then be written as

$$q_{nB} = \frac{\tilde{Q}'_{nB}}{\tilde{Q}_{pB_0}} \; ; \; q_{pE} = \frac{\tilde{Q}'_{pE}}{\tilde{Q}_{nE_0}} \; ; \; q_{pC} = \frac{\tilde{Q}'_{pC}}{\tilde{Q}_{nC_0}} \tag{13}$$

Considering the neutrality relations for each quasi-neutral region, we obtain the following *generalized integral charge equations*

$$J_{Ex} = -\frac{J_{BS}}{q_{BE}}\left\{1+\frac{b+1}{b}q_{pE}+\right.$$
$$\left.+\frac{J_{ES}}{J_{BS}}\left[1+(b+1)\,q_{nB}\right]\right\}\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_0+$$
$$+\frac{J_{BS}}{q_{BE}}\left[1+\frac{b+1}{b}q_{pE}\right]\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_{WB}-$$
$$-\frac{1}{q_{BE}}\left(1+\frac{b+1}{b}q_{pE}\right)\left[1+(b+1)\,q_{nB}\right]J_{REx} \tag{14}$$

$$J_C(x) = \frac{J_{BS}}{q_{BC}}\left\{\left(1+\frac{b+1}{b}q_{pC}\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{J_{CS}}{J_{BS}}\left[1+(b+1)\,q_{nB}\right]\right\}\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_{WB}-$$
$$-\frac{J_{BS}}{q_{BC}}\left(1+\frac{b+1}{b}q_{pC}\right)\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_0+$$
$$+\frac{1}{q_{BC}}\left(1+\frac{b+1}{b}q_{pC}\right)\left[1+(b+1)\,q_{nB}\right]J_{RCx} \tag{15}$$

where

$$q_{BE} = 1 + q_{pE} + q_{nB}$$
$$q_{BC} = 1 + q_{nB} + q_{pC} \tag{16}$$

and J_{BS}, J_{ES}, and J_{CS} are regional saturation currents. As in the Gummel and Poon (GP) model, we may define $J_{ES}/J_{BS} = \beta_D^{-1}$ and $J_{CS}/J_{BS} = \beta_I^{-1}$, etc. A comparison of equations (14)—(15) with the Gummel relation shows that the integral charge is now replaced by composite integral charges q_{BE} or q_{BC}. This corresponds to the logical extension of Gummel's integral charge concept. As a direct consequence of (14)—(15), the base current $J_B = J_{Cx} - J_{Ex}$ can now be analitically defined, in contrast with the GP model, where its introduction is mainly empirical. Another interesting feature is that the transport current is no longer symmetric, i. e., not common to the emitter and to the collector currents, unless $q_{pE} = q_{pC} = 0$, which means low-level injection. But in this case, equations (14)—(15) reduce to the Gummel relation, where only charge transport through the base is considered, and taken as symmetric. In a planar power device, where $\tilde{Q}_{nEo} \gg \tilde{Q}_{pBo} \gg \tilde{Q}_{nCo}$, we may assume that $q_{pE} \simeq 0$; however, $q_{pC} \gg 1$ inside the saturation or quasi-saturation operation.

The generalized integral charge equations may be used at the modelling of bipolar devices, such as transistors, thyristors and pn or psn diodes. A model for computer simulation of high-power transistors was develloped, and some related results were presented elsewhere [4].

REFERENCES

[1] H. K. Gummel, Bell Sys. Tech. J., 49, pp. 115-120, January 1970.

[2] H. K. Gummel and H. C. Poon, Bell Sys. Tech. J., 49, pp. 827-852, May-June 1970.

[3] H. C. Poon, IEEE Trans. Electron Devices, ED-19, pp. 719-731, June 1972

[4] P. Teixeira, Europhysics Conf. Abstracts, 4H, pp. 29-30, September 1980.

COORDINATES TRANSFORMATION FROM THE PRINCIPLE OF RELATIVITY

M. DE ABREU FARO

Instituto Superior Técnico, da UTL e Centro de Electrodinâmica, do INIC

SUMÁRIO

Apresentamos neste trabalho uma dedução das leis de transformação das coordenadas cartesianas ortogonais associadas a referenciais de inércia. Apenas se recorre ao princípio de relatividade. Assim se obtém uma forma geral dependente de uma constante, "a" determinável a partir do conhecimento da velocidade $\bar{v}$ *em* $\bar{S}$ $(\bar{x}^i)$ *e sua transformada* v *em* S (x^i).

A obtenção de "a" é, portanto, matéria de experiência directa ou de hipótese consistente com anteriores factos experimentais.

SUMMARY

We present a derivation of the transformation law of ortogonal Cartesian coordinates associated with inertial frames. Using only the principle of relativity, we have obtained general transformations depending on a constant "a". The determination of "a" is possible after the knowledge of a velocity $\bar{v}$ *in* $\bar{S}$ $(\bar{x}^i)$ *and the transformed value* v *in* S (x^i). *So, the correct value of "a" is a matter of a direct experiment or results from a hypothesis consistent with experimental facts.*

The space-time transformations of Special Relativity result necessarily from the two basic assumptions:

1 — Equivalence of inertial frames in uniform relative motion: special principle of relativity;

2 — Independence of light velocity from source inertial frame and observer inertial frame: in the Special Relativity this velocity is a universal constant "c".

Original recebido para publicação em 15/1/81.

From these two postulates we may conceive different situations from which result the Lorentz Transformations [1].

If we use only the first postulate it is possible to obtain a more general form of space-time transformations including Lorentz transformations or any other. The correct option is a matter of experience.

This fact has been pointed out by others, namely Aharoni [2] and Lee-Kalotas [3].

The aim of this paper is the same and we believe that the new fact is the derivation of the correct law on the basis of an experimental determination of a constant, depending on the knowledge of the two correspondent values of the velocities $[\bar{v}, S(\bar{x}^i)]$ and $[v, S(x^i)]$. We have obtained the analytical expression of this constant. On the other hand, we think, the derivation of the results is particulary simple.

*

* *

The homogeneity and isotropy of space-time are implicitly contained in the principle of relativity restricted to inertial frames [4].

From the homogeneity — translation invariance — we can impose the same coordinates to the origins of the space-time: $O\ [o,o,o,o] \rightleftarrows \bar{O}\ [o,o,o,o]$.

From the isotropy — rotation invariance — we can impose at $t = o$, the coincidence of the homonymous axis of ortogonal Cartesian coordinates:

$$t = o,\ xx \equiv \bar{x}\bar{x},\ yy \equiv \bar{y}\bar{y},\ zz \equiv \bar{z}\bar{z}.$$

We supose now a uniform relative motion parallel to the x-axis: relative velocity $\bar{O}/S = v_r\, e_x$.

Under the circumstances we are led, [2], [4], to the set of linear transformation equations:

$$x = a\bar{x} + b\bar{t}$$
$$t = c\bar{x} + d\bar{t} \qquad (1)$$
$$y = \bar{y}$$
$$z = \bar{z}$$

So, the crucial point is the determination of [a, b, c, d].

From (1) we obtain

$$x = \frac{b}{d}\, t + \frac{ad-bc}{d}\, \bar{x} \qquad (2a)$$

$$\bar{x} = -\frac{b}{a}\, \bar{t} + \frac{1}{a}\, x \qquad (2b)$$

By the principle of relativity the character of the motion observed is relative, so

$$\text{Velocity } \bar{O}/S = -\text{ Velocity } O/\bar{S} \qquad (3)$$

The coordinates of $\bar{O}$ in $\bar{S}$ are $\bar{S}\,(o,o,o,\bar{t})$ and the coordinates of O in S are S (o,o,o,t). Then, if we take in (2a) $\bar{x} = o$ we have $x/t = v_r$.

Similarly, if we take $x = o$ in (2b) we shall have $\bar{x}/\bar{t} = -v_r$.

Consequently we obtain the following results

$$\frac{b}{d} = v_r \qquad -\frac{b}{a} = -v_r \qquad a = d \qquad (4)$$

and the equations (2) take the form

$$x = v_r t + \frac{a^2 - bc}{a}\, \bar{x} \qquad (5a)$$

$$\bar{x} = -v_r \bar{t} + \frac{1}{a}\, x \qquad (5b)$$

Suppose now a bar of length $\bar{x}$ in $\bar{x}$-axis of $\bar{S}$. By (5a) and at the time $t=o$, we have in referential frame S a correspondent length x. These two lengths are in ratio

$$\frac{x}{\bar{x}} = \frac{a^2 - bc}{a} \qquad (6a)$$

The same experiment for a bar of length x in S leads in $\bar{S}$ and at the time $\bar{t} = o$ to a correspondent value $\bar{x}$. We have now

$$\frac{\bar{x}}{x} = \frac{1}{a} \qquad (6b)$$

By the principle of relativity this ratio must be exactly the same since the experiments are conceptually identical and made for an equal modulus of the relative velocity, v_r.

Consequently we must have

$$\frac{a^2 - bc}{a} = \frac{1}{a} \rightarrow a^2 - bc = 1 \qquad (7)$$

and the equations (5) become

$$x = v_r t + \frac{1}{a}\, \bar{x} \qquad (8a)$$

$$\bar{x} = -v_r \bar{t} + \frac{1}{a}\, x \qquad (8b)$$

*
* *

These are the more general transformations we may write using only the first postulate: the principle of relativity limited to inertial frames.

The determination of "a" is a matter of experience.

*
* *

In a general way we may conclude from (1) that for $\frac{x}{t} = v = \text{const.}$ there corresponds a unique $\frac{\bar{x}}{\bar{t}} = \bar{v} = \text{const.}$ which means that a point with coordinates $\bar{P}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \bar{t})$ moving with a velocity $\bar{v} = \frac{\bar{x}}{\bar{t}} = \text{const.}$ in $\bar{S}$ is seen in S as a point P (x,y,z,t) moving with velocity $v = \frac{x}{t} = \text{const.}$ Obviously we have $\bar{y} = y$ e $\bar{z} = z$.

The movement of $\bar{P}$ may be simulated or may correspond to a natural movement of a particle or group of waves.

In any way it is a conceptual and possible experiment with different physical means.

If we know a pair $v \rightleftarrows \bar{v}$ this is sufficient to find "a".

If we take in (8a) and (8b), $x = v\,t$ and $\bar{x} = \bar{v}\,\bar{t}$ we obtain

$$(v - v_r)\, t = \frac{1}{a}\, \bar{v}\, \bar{t} \qquad (9a)$$

$$(\bar{v} + v_r)\, \bar{t} = \frac{1}{a}\, vt \qquad (9b)$$

from which results

$$a^2 = \frac{v\,\bar{v}}{(v - v_r)\,(\bar{v} + v_r)} \qquad (10)$$

So and if the principle of relativity is observed in the physical world, accurate measurements of v must show the existence of a constant "a" depending only on the relative velocity v_r.

Once more by the principle of relativity "a" must be an even function of v_r : $a(v_r) = a(-v_r)$.

*

* *

The equations (8a) and (8b) may be written in the equivalent forms:

$$\bar{x} = a\ (x - v_r t) \qquad x = a\ (\bar{x} + v_r \bar{t})$$

$$\bar{t} = a\ (t - \frac{a^2 - 1}{a^2\ v_r}\ x) \qquad t = a\ (\bar{t} + \frac{a^2 - 1}{a^2\ v_r}\ \bar{x})$$

(11a) (11b)

By the principle of relativity we must obtain (11b) from (11a) with a simple change of the signal of v_r which implies in fact $a(v_r) = a(-v_r)$.

*

* *

The Mechanics of Newton don't put any limitation on a velocity of a material particle. In principle and in the scope of this theory we may accelerate a particle up to $\bar{v} = \infty$. On the basis that $v > \bar{v}$, for $v_r > o$, we obtain too $v = \infty$ and from (10) there result $a^2 = 1$ and $a = \pm 1$.

Since we must have the identity transformation for $v_r = o$ we adopt $a = 1$.

Introducing this value in (11b) we obtain the Galililean transformation

$$x = \bar{x} + v_r \bar{t}$$

$$t = \bar{t} \tag{13}$$

and the associate law of velocity transformation

$$v = v_r + \bar{v}$$

*

* *

On the basis of the Fizeau's experiment in a moving stream of water, [5], we have:

$$\bar{v} = \frac{c}{n} \quad \rightarrow \quad v = \frac{c}{n} + (1 - \frac{1}{n^2})\ v_r$$

where c is the velocity of the light in vacuum and n the refractive index of the water; dispersion effects are neglected.

If we introduce $\bar{v}$ and v in (10) we obtain

$$\frac{1}{a^2} \simeq 1 - \beta^2 - k\ \beta^3 - k^2\ \beta^4 \tag{14}$$

where $\beta = v_r/c$ and $k = (n - \frac{1}{n})$.

Neglecting the higher order terms in β we obtain

$$\frac{1}{a^2} \simeq 1 - \beta^2 = 1 - \frac{v_r^2}{c^2} \tag{15}$$

This is an interesting example as by experience we may reveal that $a \neq 1$ which is an essential fact because $a = 1$ cancels the desyncronization and the time becomes absolute, $t = \bar{t}$.

*

* *

This is the right moment to appeal to the second postulate of the Special Relativity.

From this we obtain a convenient pair for our purpose: $v = \bar{v} = c$.

Introducing in (10) we obtain

$$\frac{1}{a^2} = 1 - \beta^2 = \frac{1}{\gamma^2} \tag{16}$$

that corresponds to the Lorentz transformation

$$x = \gamma\ (\bar{x} + v_r\ \bar{t})$$

$$t = \gamma\ (\bar{t} + \frac{v_r}{c^2}\ \bar{x}) \tag{17}$$

and an associate law of velocity transformation

$$v = \frac{\bar{v} + v_r}{1 + \bar{v}\ v_r/c^2} \tag{18}$$

*

* *

Finally we note that it is always possible to simulate in $\bar{S}$ a non-intrinsic causal process where the velocity of P is $v = \infty$. For example, this can be done with a line of lamps triggered by a wave front parallel to this line.

But if take $\bar{v} = \infty$ in (18) we obtain a finite value $v = \frac{c^2}{v_r} > c$.

So we are not able to realize an artificial process where on both frames we have $v = \bar{v} = \infty$. We believe this is an essential point.

Conclusions:

— We have established a general form of coordinates transformation using only the principle of relativity and concerning ortogonal Cartesian coordinates.
In that form we have a degree of liberty: it is the constant $a^2 = \dfrac{v\,\bar{v}}{(v - v_r)\,(\bar{v} + v_r)}$.

— It is sufficient to know two velocities, v and $\bar{v}$, to determine "a". This is a matter of experience.

— The second postulate of the Special Relativity provides a convenient pair $v = \bar{v} = c$ leading to $a^2 = 1/(1 - \beta^2)$ which corresponds to the Lorentz Transformations.

— We can use another kind of phenomena to determine "a".

References

[1] — M. Abreu Faro — Sobre uma interpretação física da transformação de Lorentz — Memórias da Acad. de Cienc. de Lisboa, Vol. XXV, 1983.

[2] — J. Aharoni — The Special Theory of Relativity — Clarendon Press — Oxford — 1965.

[3] — A. R. Lee and T. M. Kalotas — Lorentz Transformations from the firts postulate — Am. J. Phys. Vol. 43, N.º 5, May 1975.

[4] — F. Rohrlich — Classical Charged Particles — Addison — Wesley, Reading, Massachusetts, 1965.

[5] — W. H. McCrea — Relativity Physics — Methuen's Monographs on Physical Subjects — John Wiley, London — 1954.

EXPERIMENTAL RESULTS OF THE CONDITIONAL SIMULATION OF AN IRON OREBODY

ANTÓNIO JORGE DE SOUSA

ABSTRACT

A numerical model of a zone in an iron orebody is obtained by the conditional simulation of Fe grades in technological blocks. This technique ensures that simulated values match the mean structural features of the mineralization (auto-correlation and histogram) and assume experimental grades in sampled points.

RESUMO

Através da simulação condicional dos teores nos blocos tecnológicos de uma zona de um jazigo de Ferro, obtém-se um modelo numérico que reproduz os aspectos estruturais da mineralização (auto-correlação e histograma) e toma os valores reais nos pontos amostrados.

In the planning stage of a minig project, it is often useful to establish a model of the orebody, where the variability of a quality parameter of the ore is reproduced. The fluctuations of this parameter in a certain time basis may then be predicted from the model, allowing the assessment of the impact of these flutuations on the mill feed so as to define blending policies (if necessary). The mining method operator may also be applied to an input provided by the model, in order to study the effect of extracting procedures on the quality parameter variability and compare different exploitation alternatives.

This model of the orebody, which must provide unbiased variances, is constructed by the **Conditional Simulation technique** (JOURNEL, 1974). If the sampled values of the quality parameter are viewed as the realization of a Random Function (MATHERON, 1970), the Conditional Simulation technique generates another realization of the same Random Function, which reflects the structural features revealed by experimental data (auto-correlation and histograms and assumes the observed values in the sampled points (it is conditional to reality).

Original recebido para publicação em 15/1/81.

Theory of conditional simulation is presented elsewhere, MATHERON (1972), JOURNEL (1974), DOWD (1979) and SOUSA (1979). In this note, an aplication to Fe grades is performed, in order to establish a model of the variability of that parameter in technological blocks of an iron orebody.

EXPERIMENTAL RESULTS OF SIMULATION

The Moncorvo iron orebody (Northest of Portugal) was recognized by a set of drillings, sampled every two meters for Fe grade. This is the parameter to be simulated and its spatial structure was depicted by the **variogram,** an auto--correlation function, definned by:

$$\gamma(h) = VAR\,[Z(x+h) - Z(x)]$$

where $Z(x+h)$ and $Z(x)$ are values of grades in two points linked by a vector h. Coordinates of points (in R^3) are denoted x.

The experimental variogram obtained in the deposit is shown in Fig. 1. An isotropic model with nugget effect and two spheric type nested schemes was fitted to the experimental curve. The simulation technique ensures that the new realization of the random function obeys to this variogram model, the parameters of which are $C_0 = 18\ (\%)^2$ (nugget effect); $C_1 = 15\ (\%)^2$ (sill of the first scheme); $C_2 = 8\ (\%)^2$ (sill of the second scheme); $a_1 = 7$ m (range of the first scheme); $a_2 = 29$ m (range of the second scheme).

The experimental histogram of Fe grades in samples is shown in Fig. 2. Also, point values of the variable obtained from simulation are expected to follow this histogram.

The simulation was performed in a 200x200x40 m zone of the orebody (where production is planned do start). In this zone, real data to which simulation is conditioned, are 80 samples located in 4 drillholes. The general purpose of this simulation is to model the variability of grades in a daily base block of 25x12.5x10 m, in order to assess the

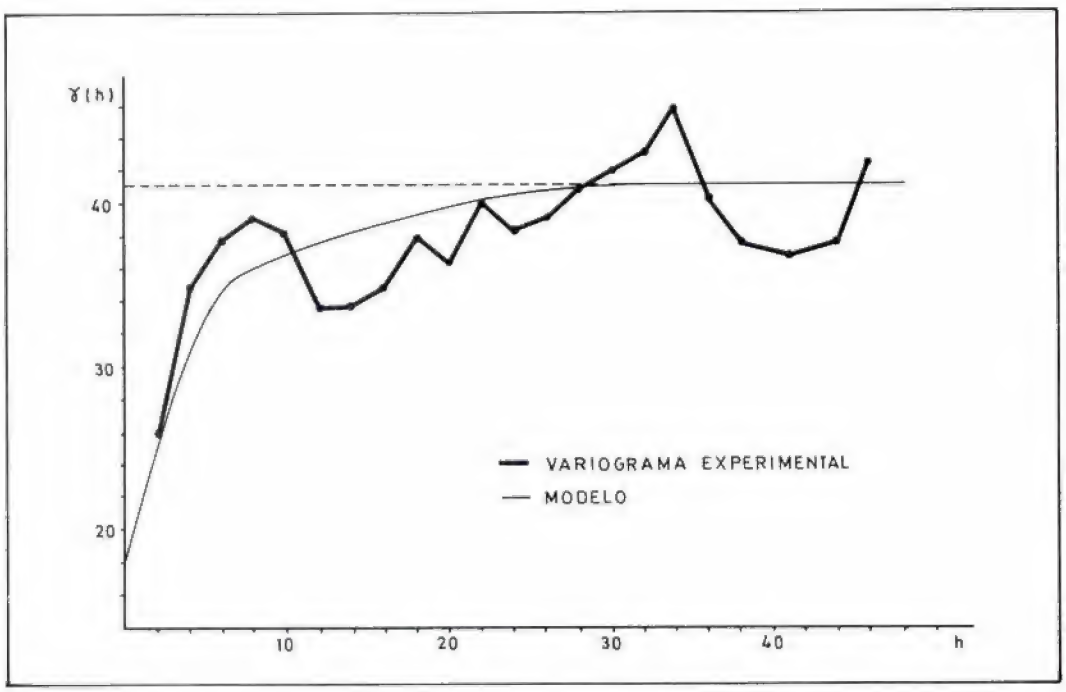


FIGURA 1
Experimental variogram and fitted model.

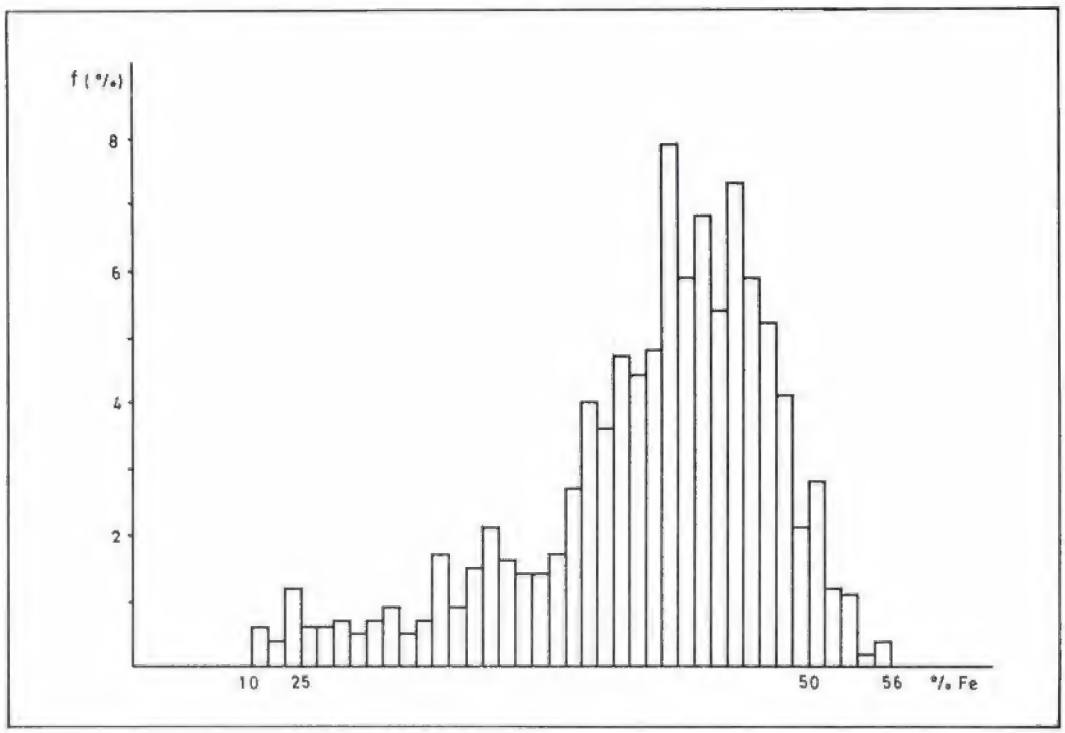


FIGURA 2
Histogram of Fe grade in samples.

effect of the mining method and blending policies into the fluctuations expected in the feed of the dressing plant.

The conditional simulation algorithm applied in this case, includes the following steps:

1. Inverse Gaussian transform of data values $Z(x_i)$ in order to obtain a normal distribution of a new variable $Y(x_i)$.
2. Computation of variogram $\gamma_N(h)$ for variable $Y(x_i)$ and parameter estimation of the theoretical scheme adjusted; determination of the spheric type covariance function $C(h)$ by $C(h) = C(0) \quad \gamma_N(h)$, where $C(h)$ is the 3 dimensional covariance of $Y(x_i)$ and $C(0)$ is the a priori variance of data. Simulated normal points in R^3 are expected to follow this covariance scheme.
3. Generation of 119 random points in a line with a 1 – dimensional covariance $C_1(u)$, the parameters of which are deduced from the 3 – dimensional model $C(h)$; $C_1(u)$ is relared to $C(h)$ by $C_1(u) = \partial h / \partial h\, C(h)$.
4. Integration, in a regular mesh of 23 040 points, of particular contributions of each one of the 1 – dimensional above mentioned simulations, performed in the lines joinning the mid-points of opposite edges of a regular icosahedron **(turning bands method,** in G. Matheron's terminology (MATHERON, 1972)). Steps 1. and 2. are necessary because this procedure produces, by the central limit theorem, normal distributed points. The output of this step is a set of non-conditional simulated point values $Y_S(x)$.
5. Direct Gaussian transform of simulated point values in R^3, in order to match the histogram of samples.
6. Clustering of 45 simulated points in each 25x12.5x10 m block and averaging grade values per block. The result

of this procedure is a set non-conditional simulated average grades per block $(Z_S(V_\alpha))$.

7. Inverse Gaussian transform of non-conditional simulated values $Z_S(V_\alpha)$ in order to obtain a normal distribution of $Y_S(V_\alpha)$.
8. Calculation of a linear estimator (by Kriging, MATHERON, 1970), of deviations (from $Y(x_i) - Y_S(x_i)$), in all simulated blocks and summing these values to $Y_S(V_\alpha)$. The output of this step is a set of conditional normal values $Y_C(V_\alpha)$.
9. Direct Gaussian transform of $Y_C(V_\alpha)$ in order to obtain $Z_C(V_\alpha)$.

By means of the conditional simulation technique, a numerical model of grades in blocks of the above mentioned zone was obtained. This model is the set of values $Z_C(V_\alpha)$.

Taking this model as an input, a variogram of simulated grades in blocks was computed. This variogram is shown in Fig. 3 and shows a good agreement to the experimental one, obtained from samples by a regularization procedure (MATHERON, 1970).

In order to depict the distribution of simulated grades per block, an histogram of these values was computed (Fig. 4). This histogram is the basis for further planning.

The exploitation method and blending procedures may be simulated from the numerical model containing $Z_C(V_\alpha)$ values.

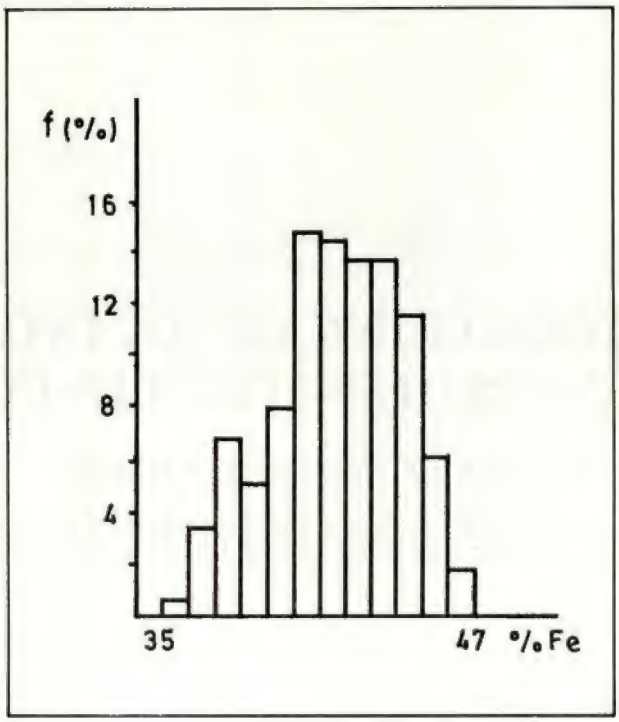


FIGURA 4 — Histogram of simulated grades in blocks.

ACKNOWLEDGMENTS

I am indebted to FERROMINAS, EP for permission to publish data. This work was partially supported by a Grant from JNICT (SNARAD PROJECT — System for Natural Resources Appraisal and Development). I am indebted to Professor Quintino Rogado for his encouragement.

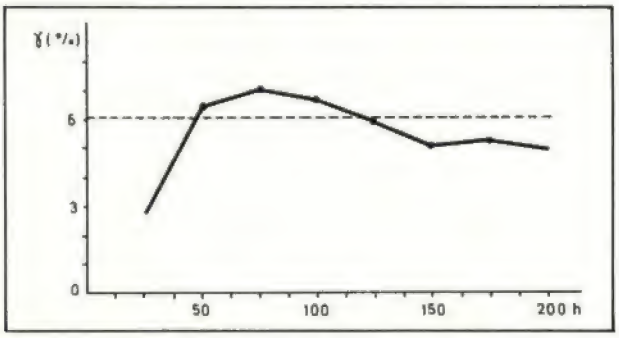


FIGURA 3 — Variagram of simulated grades in blocks.

REFERENCES

DOWD, P. (1979) — The conditional simulation of regionalized variables. Técnicas n.° 451/452, Jan./Fev./Mar. 1979, p. 225-234.

JOURNEL, A. (1974) — Simulations Conditionelles. Théorie et Pratique. Thèse docteur ingénieur, Nancy, 110 p.

MATHERON, G. (1970) — La théorie des variables régionalisées et ses applications. Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique de Fontainebleau. Fascicule 5, 212 p.

MATHERON, G. (1972) — The turnning bands: a method for simulating random functions in R^n. N — 303, Centre de Géostatistique de Fontainebleau, 28 p.

SOUSA, A.J. (1983) — Simulação de Funções Aleatórias Estacionárias. In Encontros sobre Métodos Quantitativos aplicados às Variáveis Regionalizadas, pp 165-171. INIC, Lisboa 1983.

MODELLING OF AN INDUCTION MOTOR SPEED CONTROL WITH SLIP-POWER RECOVERY

J. SANTANA e J. GONÇALVES DENTE

Centro de Automática da Universidade Técnica de Lisboa (INIC)
Departamento da Engenharia Electrotécnica (IST)

ABSTRACT

The sliding — contacts equation is used to develop a dynamic model for the induction motor with static inverter on the rotor circuit.

Good agreement is obtained with experimental results in the steady-state.

With that model, equivalent Park machine equations are developed.

0. INTRODUCTION

A speed regulating scheme using a wound rotor induction motor and a static synchronous inverter proves to achieve good results as far as efficiency and reliability are concerned.

Fig. 1 represents the scheme analysed in the paper. The asynchonous machine, fed from the a.c. source, has its secondary circuit connected to an a.c./a.c. converter which is composed by a rectifier bridge and a synchronous inverter.

In spite of many papers which appeared during the sixties and in which this system was analysed [1], [2], [3], a satisfactory modelling has yet to be found. In a recent paper dealing with this subject [4] a new approach was made to solve the above mentioned problem, nevertheless it is the authors' opinion that the model presents some limitations. In this paper the sliding-contacts equation [5] applied to the rectified generator [6] allows the development of a dynamic model. The steady-state behaviour of the system is studied and compared to experimental results.

Making a change of variables, the Park equations can be obtained. The differences between the representation of this paper and the one proposed in reference [4] thereby become evident.

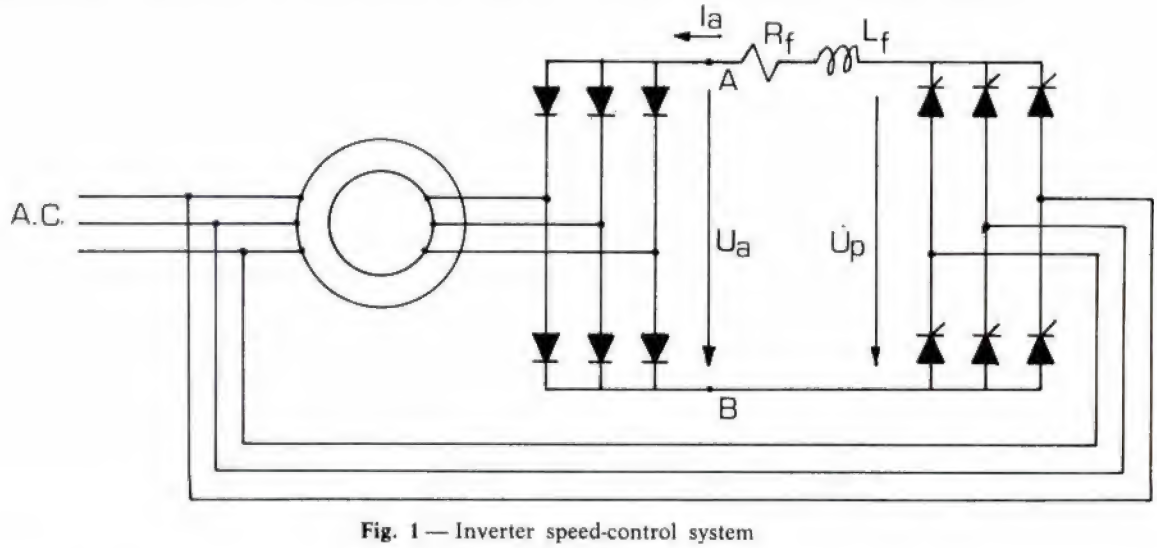


Fig. 1 — Inverter speed-control system

Original recebido para publicação em 20/2/84.

1. MODELLING

The stator behaviour can be represented by two quadrature windings α, β, when the polyphase power supply is symmetrical [7]. The rotor and the rectifier bridge can be seen as an armature of a D.C. machine. The fictitious brushes of the commutation circuit are not in a fixed position, but they make an angle ρ that varies according to the load.

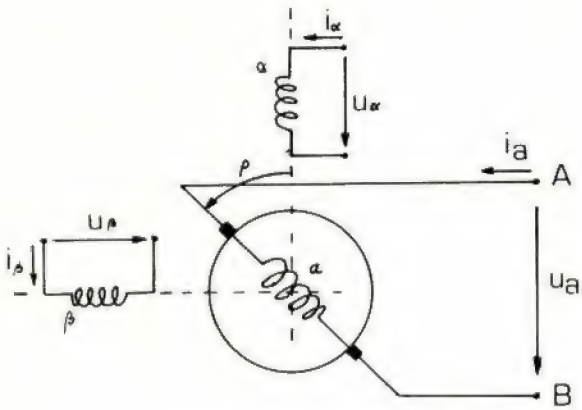


Fig. 2 — Equivalent machine

The α, β circuits are filiform and their equations derive from Faraday law. For the "winding a" it is necessary to apply an extension of the Faraday law to the commutation circuits [5].

So the system equations are

$$u_\alpha = R_\alpha\, i_\alpha + \frac{d\psi_\alpha}{dt} \tag{1}$$

$$u_\beta = R_\beta\, i_\beta + \frac{d\psi_\beta}{dt} \tag{2}$$

$$u_a = R_a\, i_a + \frac{d\psi_a}{dt} + \frac{\dot{\Theta}_r - \dot{\rho}}{i_a} \cdot \frac{\partial W'_m}{\partial \rho} \tag{3}$$

$$\rho = \rho \quad \text{(state variables of the system)} \tag{4}$$

$$\Gamma_e - \Gamma_L = J\,\frac{d\dot{\Theta}_r}{dt} + D\,\dot{\Theta}_r \tag{5}$$

Neglecting the saturation effects we have:

$$W'_m = W_m = \frac{1}{2}\,L_\alpha\, i_\alpha^2 + \frac{1}{2}\,L_\beta\, i_\beta^2 + \frac{1}{2}\,L_a\, i_a^2 + M_{a\alpha}\, i_a\, i_\alpha + M_{a\beta}\, i_a\, i_\beta$$

where

$$M_{a\alpha} = M_{\alpha a} = -\,M\cos\rho \qquad M_{a\beta} = M_{\beta a} = -\,M\sin\rho$$

The equations (1) to (3) are then:

$$u_\alpha = R_a\, i_\alpha + L_\alpha\frac{di_\alpha}{dt} - M\cos\rho\,\frac{di_a}{dt} + \dot{\rho}\,M\, i_a\sin\rho \tag{6}$$

$$u_\beta = R_\beta\, i_\beta + L_\beta\frac{di_\beta}{dt} - M\sin\rho\,\frac{di_a}{dt} - \dot{\rho}\,M\, i_a\cos\rho \tag{7}$$

$$u_a = R_a\, i_a + L_a\frac{di_a}{dt} - M\cos\rho\,\frac{di_\alpha}{dt} - M\sin\rho\,\frac{di_\beta}{dt} + \dot{\Theta}_r\, M\, i_\alpha\sin\rho - \dot{\Theta}_r\, M\, i_\beta\cos\rho \tag{8}$$

The linear and sinusoidal hypothesis are not necessary for the sliding contacts equation but they simplify the model without significant errors.

It is necessary to complement these equations with another one that enables us to determine the brushes position, which is defined by diodes in conduction. So, we associate the equivalent brushes position to the phases where the voltage is higher [6].

So, using a prove phase with voltage U'_a and position ρ', we have:

$$\left(\frac{\partial U'_a}{\partial \rho'}\right)_{\rho' = \rho} = 0 \qquad \text{and} \qquad \left(\frac{\partial^2 U'_a}{\partial \rho'^2}\right)_{\rho' = \rho} < 0$$

or

$$0 = M\sin\rho\,\frac{di_\alpha}{dt} - M\cos\rho\,\frac{di_\beta}{dt} + (\dot{\rho} - \dot{\Theta}_r)\, L_a\, i_a + \dot{\Theta}_r\, M\, i_\alpha\cos\rho + \dot{\Theta}_r\, M\, i_\beta\sin\rho \tag{9}$$

The equations (5) to (9) form a mathematical model for the system, but it presents a disadvantage which results from the fact that the stator variables are time-dependent in steady-state. To obviate this problem, we make a change of variables in the stator:

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\Theta_s & \sin\Theta_s \\ \sin\Theta_s & -\cos\Theta_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d \\ q \end{bmatrix}$$

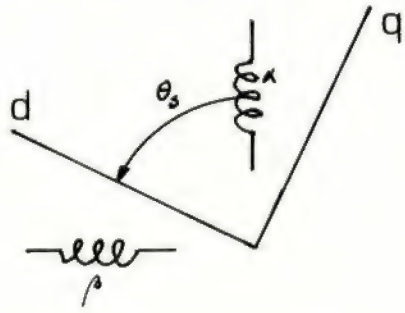


Fig. 3 — Change of variables

With this transformation, the system equations becomes:

$$u_{ds} = R_s\, i_{ds} + L_s \frac{di_{ds}}{dt} + \dot{\theta}_s\, L_s\, i_{qs} - - M \cos\delta \frac{di_a}{dt} + (\dot{\theta}_s + \dot{\delta})\, M\, i_a \sin\delta \qquad (10)$$

$$u_{qs} = R_s\, i_{qs} + L_s \frac{di_{qs}}{dt} - \dot{\theta}_s\, L_s\, i_{ds} + + M \sin\delta \frac{di_a}{dt} + (\dot{\theta}_s + \dot{\delta})\, M\, i_a \cos\delta \qquad (11)$$

$$u_a = R_a\, i_a + L_a \frac{di_a}{dt} - M \cos\delta \frac{di_{ds}}{dt} + + M \sin\delta \frac{di_{qs}}{dt} - \dot{\theta}_{sr}\, M\, i_{ds} \sin\delta - - \dot{\theta}_{sr}\, M\, i_{qs} \cos\delta \qquad (12)$$

$$0 = M \sin\delta \frac{di_{ds}}{dt} + M \cos\delta \frac{di_{qs}}{dt} + (\dot{\theta}_s + \dot{\delta})\, L_a\, i_a - \dot{\theta}_{sr}\, M\, i_{ds} \cos\delta + + \dot{\theta}_{sr}\, M\, i_{qs} \sin\delta \qquad (13)$$

$$M\, i_a\, (i_{ds} \sin\delta + i_{qs} \cos\delta) - - T_L = J \frac{d\dot{\theta}_r}{dt} + D\, \dot{\theta}_r \qquad (14)$$

where

$$\delta = \rho - \theta_s \qquad \text{and} \qquad \dot{\theta}_{sr} = \dot{\theta}_s - \dot{\theta}_r$$

We choose the dq synchronous reference such that $U_{qs} = 0$. This simplification is already classical when the induction machine is fed from a voltage source [8].

The voltage U_a differs from U_p (as we can see in fig. 1) by the presence of the R, L filter; and so,

$$Up = R_F \cdot i_a + L_F \frac{di_a}{dt} + U_a$$

The equation (12) is modified:

$$Up = R_T\, i_a + L_T \frac{di_a}{dt} - M \cos\delta \frac{di_{ds}}{dt} + + M \sin\delta \frac{di_{qs}}{dt} - \dot{\theta}_{sr}\, M\, i_{ds} \sin\delta - - \dot{\theta}_{sr}\, M\, i_{qs} \cos\delta \qquad (12.a)$$

where

$$R_T = R_a + R_F$$

$$L_T = L_a + L_F$$

2. STEADY-STATE

In this situation the currents in the equations (10) to (14) are constant and the equivalent brushes are fixed in the synchronous frame:

$$\frac{di_a}{dt} = \frac{di_{ds}}{dt} = \frac{di_{qs}}{dt} = 0 \quad \text{and} \quad \dot{\delta} = 0$$

So, the steady-state equations are given by:

$$U_{ds} = R_s\, I_{ds} + \dot{\theta}_s\, L_s\, I_{qs} + \dot{\theta}_s\, M\, I_a \sin\delta \qquad (15)$$

$$0 = R_s\, I_{qs} - \dot{\theta}_s\, L_s\, I_{ds} + \dot{\theta}_s\, M\, I_a \cos\delta \qquad (16)$$

$$Up = R_T\, I_a - \dot{\theta}_{sr}\, M\, I_{ds} \sin\delta - - \dot{\theta}_{sr}\, M\, I_{qs} \cos\delta \qquad (17)$$

$$0 = \dot{\theta}_{sr}\, L_a\, I_a - \dot{\theta}_{sr}\, M\, I_{ds} \cos\delta + + \dot{\theta}_{sr}\, M\, I_{qs} \sin\delta \qquad (18)$$

$$M\, I_a\, (I_{ds} \sin\delta + I_{qs} \cos\delta) - T_L = 0 \qquad (19)$$

The resolution of the equations (15) to (18) is not easy even in steady-state, so we solve this problem by a numerical method (Newton-Raphson).

On the pictures that follow we represent the theoretical and experimental results for a system defined by:

$U_{ds} = \sqrt{2}\,.300$ V, $R_s = 3\,\Omega$, $R_T = 10\,\Omega$, $L_s = .46$ H, $L_a = .48$ H, $M = .44$ H, $= 50$ Hz

(1) $Up = -9.2$ V
(2) $Up = -101.2$
(3) $Up = -193$
(4) $Up = -285$

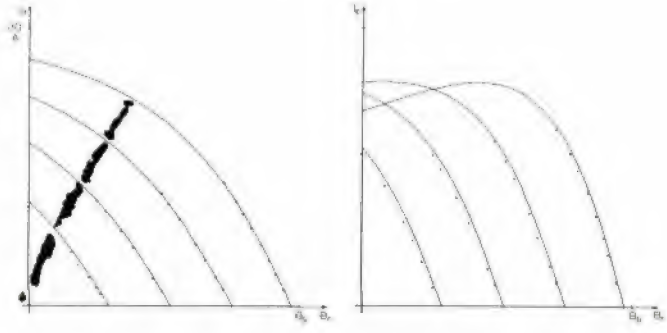


Fig. 4 — Steady-state system characteristics

In the above results we achieve a fair coincidence, so it not necessary make any correction [9], at least as far as the verified zones are concerned.

3. PARK EQUATIONS

In the previously developed study, the rotor representation is obtained by means of a coil that takes a certain position in the dq chosen referencial.

If we change the variables as follows, the m.m.f. of the rotor is generated by two circuits positioned on the same axis where the stator values are defined:

$$i_{dr} = i_a \cos \delta$$
$$i_{qr} = i_a \sin \delta$$

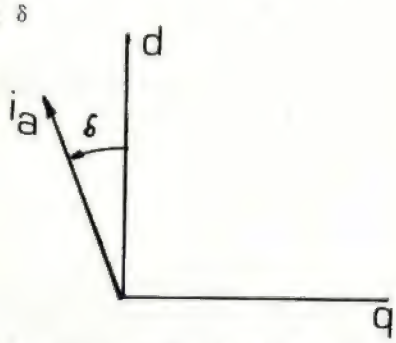


Fig. 5 — Change of variables

According to this change, the equations (10) to (13) will be as follows:

$$U_{ds} = R_s\, i_{ds} + L_s \frac{di_{ds}}{dt} - M \frac{di_{dr}}{dt} + \dot{\Theta}_s\, L_s\, i_{qs} - \dot{\Theta}_s\, M\, i_{qr} \qquad (21)$$

$$0 = R_s\, i_{qs} + L_s \frac{di_{qs}}{dt} - M \frac{di_{qr}}{dt} - \dot{\Theta}_s\, L_s\, i_{ds} + \dot{\Theta}_s\, M\, i_{dr} \qquad (22)$$

$$U_{dr} = R_a\, i_{dr} + L_a \frac{di_{dr}}{dt} - M \frac{di_{ds}}{dt} - \dot{\Theta}_{sr}\, M\, i_{qs} + \dot{\Theta}_{sr}\, La\, i_{qr} \qquad (23)$$

$$U_{qr} = R_a\, i_{qr} + L_a \frac{di_{qr}}{dt} - M \frac{di_{qs}}{dt} + \dot{\Theta}_{sr}\, M\, i_{ds} - \dot{\Theta}_{sr}\, La\, i_{dr} \qquad (24)$$

Where

$$U_{dr} = U_a \cos \delta \quad \text{and} \quad U_{qr} = -\, U_a \sin \delta$$

In Park equations the voltage U_a is made up of two components U_{dr} and U_{qr} whose values depend on the currents i_{dr} and i_{qr}.

Since we have

$$\text{tg}\ \delta = -\, i_{qr}/i_{dr}$$

the above referred components are given by:

$$U_{dr} = U_a \cos\,(\text{arctg}\ [-\, i_{qr}/i_{dr}])$$
$$U_{qr} = -\, U_a \sin\,(\text{arctg}\ [-\, i_{qr}/i_{dr}])$$

So we come to the conclusion that the component U_{qr} is not always necessarily equal to zero, as was done in the above mentioned paper [4].

4. CONCLUSION

Our study enables us to conclude that the use of the sliding-contacts equation leads to an acceptable model to represent this system, at least in steady-state.

The sliding-contacts equation apart from being easier to apply, has also proved to be power-ful means of analysis of the electromechanical conversion system, specially when compared to the classical method that results from the use of the Park transformation.

We will try to develop this model in the future by presenting the dynamical behaviour of the system.

REFERENCES

1 — A. LAVI and R. I. POLGE — «Indution Motor Speed Control with Static Inverter in the Rotor»; I. E. E. E. Transactions on Power Apparatus and Systems, vol. PAS-85, n.° 1, January 1966.

2 — WILLIAM SHEPHERD and JACK STANWAY — «Slip Power Recovery in an Induction Motor by the Use of a Thyristor Inverter»; I. E. E. E. Transactions of Industry and General Applications, vol. IGA-5, n.° 1, January/ /February 1969.

3 — DEREK A. PAICE — «Speed Control of Large Induction Motors by Thrystor Converters»; I. E. E. E. Transactions on Industry and General Applications, vol. IGA-5, n.° 5, September/October 1969.

4 — V. N. MITTLE, K. VENKATESAN and S. C. GUPTA — «Stability Analysis of a Constant Torque Static Slip--Power-Recovery Drive»; I. E. E. E. Transactions on Industry Applications, vol. IA-16, n.° 1, January/February 1980.

5 — M. S. GARRIDO — «Les équations générales des machines déduites de l'electromagnetisme»; Revue E, vol VI, n.° «9, 1971.

6 — H. BUYSE and M. S. GARRIDO — «A new dynamical model of rectified output A. C. generator»; Electric Machines and Electromechanics, n.° 3, 1978.

7 — N. HANCOCK — «Matrix Analysis of Electric Machinery»; Pergamon Press.

8 — T. A. LIPO and P. C. KRAUSE — «Stability Analysis of a Rectifier Inverter Induction Motor Drive»; I. E. E. E. Transactions on Power Apparatus and Systems, vol. PAS-88, n.° 1, January 1969.

9 — M. S. GARRIDO and E. GUDEFIN — «Équations des circuits à commutation non linéiques»; Revue E, vol VII, n.° 3, 1972.

ACKNOWLEDGEMENT

The authors are grateful to Professor M. S. Garrido for the profitable discussion on the subject of this paper.

STRIP GRATING LEAKY-WAVE ANTENNA

A.M. BARBOSA e **J. FIGANIER**

Departamento de Engenharia Eelectrotécnica e de Computadores, Secção de Propagação e Radiação e Centro de Análise e Processamento de Sinais, IST

ABSTRACT

The use as a leaky-wave antenna of a periodic metallic strip grating over a dielectric slab backed by a perfectly conducting plane is discussed. Typical sets of parameters are given.

RESUMO

Discute-se a aplicação como antena "leaky-wave" de uma estrutura constituída por uma placa dieléctrica sobre um plano metálico condutor e coberta por uma grelha de tiras metálicas. Apresentam-se valores típicos dos parâmetros desta estrutura.

INTRODUCTION

A grounded dielectric slab covered by a strip grating has been studied earlier by Sigelmann and Ishimaru[1], Sigelmann[2], Jacobsen[3] and Balling[4]. In their analysis they have used approximations which are valid for narrow slots[1-2] or narrow strips[3-4]. Sigelmann discussed only solutions of the modal equation of the surface wave type. Jacobsen discussed also the leaky wave solutions and gave numerical results for structures where the dielectric slab has a high dielectric constant. Hence the fundamental spatial harmonic is a slow wave and radiation is expected to be due only to higher order harmonics. Balling dealt with a structure of the same type and examined the range of parameters for a viable antenna with narrow slots radiating by an higher order harmonic.

More recently several leaky-wave antennas have been proposed based on different types of dielectric waveguides perturbed by strip gratings[5-8]. In these structures the dominant mode is a slow wave and radiation is due to higher order harmonics, namely $n = \pm 1$. When the strips are narrow and the perturbation due to them is small the grating effect may be analysed in terms of a linear array. An analysis based on a spectral domain approach has been presented for a leaky wave antenna composed of an array of thin metallic strips on a rectangular dielectric rod[9].

Elsewhere[10] the authors have studied the wave guiding characteristics of a metallic strip grating running parallel to an impedance plane using a different method which is applicable to a structure with an arbitrary value of the slot width-period ratio and have shown that this structure supports leaky waves. However the case considered refers to a structure with homogeneous dielectric which is not adequate for a practical antenna.

In this note a structure where the metallic strips are placed periodically along a grounded dielectric slab is analysed. As was to be expected this structure also supports leaky waves and if the parameters are suitably chosen the design of a practical leaky-wave antenna may be based on it.

ANALYSIS AND MODAL EQUATION

A time dependence $\exp(j\omega t)$ is assumed and field propagation along the z-axis (Fig. 1) is represented by the factor $\exp(-j\lambda z)$. Only TM propagation with respect to the z-axis is studied.

In mathematical terms we are dealing with a boundary value problem with mixed type boundary conditions which is formulated as a modified Riemann-Hilbert problem[10]. The details of the calculations are omitted since we follow closely Ref. 10. Due to the presence of two dielectrics we have now two sets of transverse wavenumbers $h_{n_{1,2}} = (k_{1,2}^2 - \lambda_n^2)^{1/2}$, $k_{1,2} = \omega(\epsilon_{1,2}\mu_o)^{1/2}$ and $\lambda_n = \lambda - n\pi/\ell$, 2 being the period of the structure. To simplify the notation we use henceforth h_1 and h respectively for h_{o_1} and h_{o_2}. It is assumed that $\mathrm{Im}(h_{n_2}) < o$, for $n \geqslant 1$. This condition is sufficient to ensure the convergence of the series for the potential but allows the existence of leaky wave solutions[10].

Original recebido para publicação em 30/11/84.

The calculations lead to the following expression for the modal equation

$$f(h) =$$

$$= \{\epsilon_r [1 + \exp(-2jh_1 b)] + \frac{h_1}{h} [1 - \exp(-2jh_1 b)]\} (\theta_1 - \pi)$$

$$+ 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\alpha_m (h)}{m^2} \sin(m\theta_1)$$

$$+ \sum_n{}' u_n (h) \sum_m{}' \frac{\sin(m\theta_1)}{m^2} A_{mn} = o \qquad (1)$$

where the prime stands for omission of the terms $n = o$ and $m = o$; $\theta_1 = \pi d/\ell$, $\epsilon_r = \epsilon_1 / \epsilon_2$ and

$$\alpha_m = j \frac{\ell}{\pi} (1 + \epsilon_r) h_1 [\exp(-2jh_1 b) - 1]$$
$$[P_{m-1} (\cos \theta_1) - P_m (\cos \theta_1)]$$

In the last expression, P_m is the Legendre polynomial of order m. The functions u_n are the solutions of an infinite system of algebraic equations whose matrix is $A = [A_{mn}]$. This system is the same as for the case of a single dielectric structure[10] except for the expression of the perturbation term which now depends on ϵ_r.

Solutions of equation (1) in the upper half of the h – plane correspond to improper modes (leaky wave modes) and solutions in the lower half of the h – plane correspond to proper modes; those on the negative imaginary axis are surface wave modes.

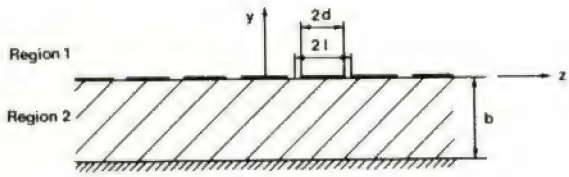


Fig. 1 Geometry of the structure

NUMERICAL RESULTS AND CONCLUSIONS

The modal equation was solved numerically using the method mentioned in Ref. 10. Numerical results have been obtained for structures with periods $2\ell < \lambda_o / 2$, λ_o being the free space wavelength. If the propagation constant of the fundamental harmonic is near to k_2 the condition $2\ell < \lambda_o / 2$ ensures that the propagation constants of the higher order harmonics lie outside the visible region. Thus a single beam radiating almost endfire may be obtained.

The numerical results show that only structures with small slot widths, in the order of 0.05ℓ, support a dominant mode with leakage constant not too high. This is an expected result taking into account that the strip currents are perpendicular to the edges. Larger slot widths give rise to attenuation constants too large to be appropriate for an antenna with a narrow beam and a good sidelobe level.

In Figs. 2 and 3 the longitudinal phase velocity (v) and the longitudinal attenuation constant (α) of the dominant leaky-wave mode are given for some sets of parameters. Curve 1 applies to a single dielectric (air) structure and is given for comparison. Fig. 2a shows that a dominant mode with $v/c \approx 1$ is possible only with a small ϵ_r (curves 2 and 3). Increasing the relative dielectric constant (curve 4) gives rise to slow modes and radiation is no longer possible due to the fundamental harmonic. Moreover the increase in ϵ_r reduces the useful bandwidth of the structure. In Figures 2b and 3b, curves 2 and 3 differ only by the slot width, (curve 1 is the same as curve 2 in Figures 2a and 3a and is repeated for comparison), showing that the leakage may be controlled almost without affecting the phase velocity.

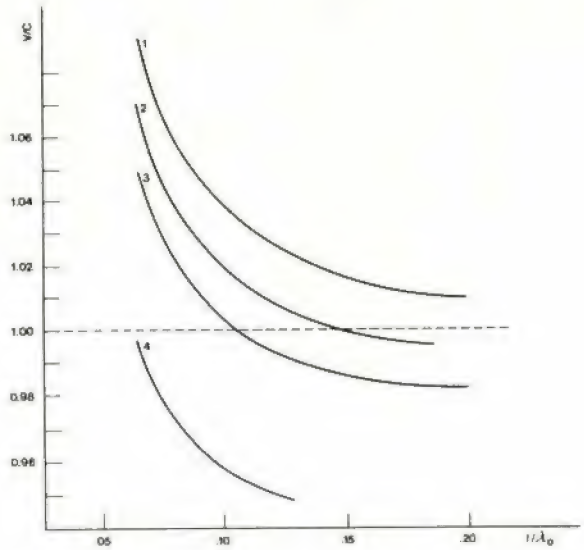


Fig. 2a Phase velocity of the first leaky mode

$\ell - d = 0.05$
$b = 4$

curve	1	2	3	4
ϵ_r	1.0	1.05	1.1	1.3

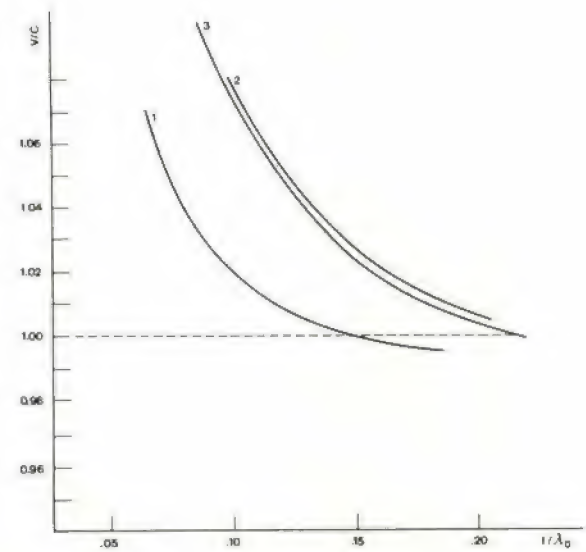


Fig. 2b Phase velocity of the first leaky mode

$\epsilon_r = 1.05$

curve	1	2	3
b	4ℓ	2ℓ	2ℓ
$\ell - d$	$0.05\ \ell$	0.05ℓ	0.025ℓ

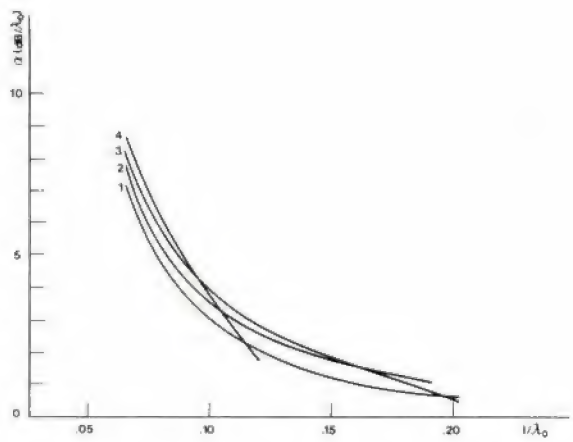


Fig. 3a Attenuation constant of the first leaky mode. Same parameters as in Fig. 2a.

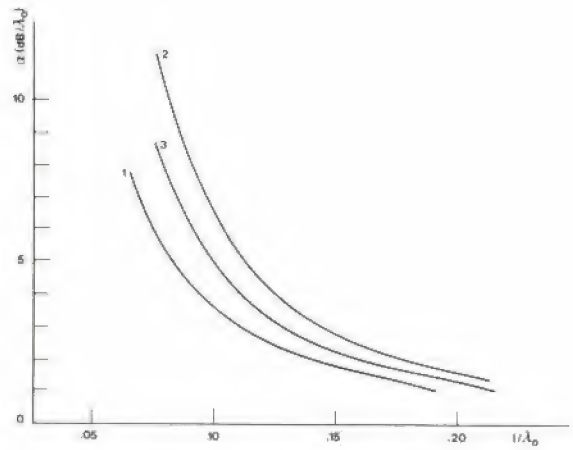


Fig. 3b Attenuation constant of the first leaky mode. Same parameters as in Fig. 2b.

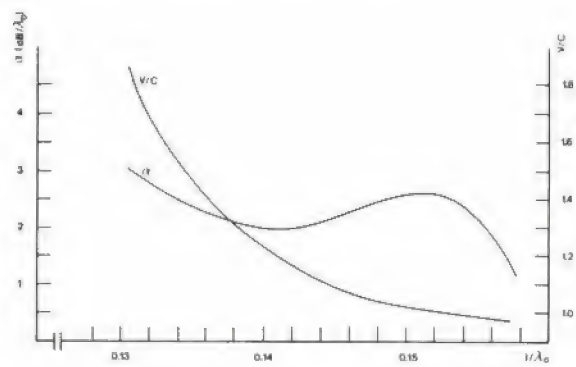


Fig. 4 Phase velocity and attenuation constant of the second leaky mode ℓ – d = 0.025ℓ, b = 2.5 ℓ, ϵ_r = 3

The thickness b of the dielectric also controlls the radiation properties of the structure: for a small b the first leaky mode is dominant; for a greater value of b the leakage constant of the second leaky mode decreases (Fig. 3b) and may become comparable to the first leaky mode constant. Thus single mode operation may become impossible. For structures with small slot widths we may estimate the allowed values of b for single mode operation by taking into account that the second leaky mode tends to the TM_1 mode of the parallel plate waveguide with the same dielectric and thickness.

The operation of the strip grating in the second leaky mode may also be of some interest. For a structure with a higher dielectric constant, say ϵ_r = 3, keeping the same frequency and geometrical parameters, the first mode is no longer a leaky mode but becomes an improper surface mode * (with root locus in the positive imaginary axis of the h-plane) whilst the second leaky mode becomes a fast wave with phase velocity (Fig. 4) suitable for frequency scanning operation although only for a smaller frequency range.

The radiation of a structure of this class in the presence of a suitable primary source has been studied and the results, namely the radiation patterns, are reported elsewhere[12].

REFERENCES

1. Sigelmann, R.A., and Ishimaru, A.: "Radiation from periodic structures excited by an aperiodic source", IEEE Trans., 1965, AP-13, pp 354-364.
2. Sigelmann, R.A.: "Surface waves on a grounded dielectric slab covered by a periodically slotted conducting plane", IEEE Trans., 1967, AP-15, pp 672-676.
3. Jacobsen, J.: "Analytical, numerical and experimental investigation of guided waves on a periodically strip--loaded dielectric slab", IEEE Trans., 1970, AP-18, pp 379-388.
4. Balling, P.: "Periodically modulated dielectrically filled waveguide as a microwave antenna", Electron. Lett., 1969, 5, pp 508-510.
5. Klohn, K., Horn., R.E., Jacobs, H., and Freibergs, E.: "Silicon waveguide frequency scanning linear array antenna", IEEE Trans., 1978, MTT-26, pp. 764-773.
6. Itoh, T., and Adelseck, B.: "Trapped image guide leaky wave antennas for millimeter wave applications, IEEE Trans., 1982, AP-30, pp 505-509.
7. Kobayashi, S., Lampe, R., Mittra, R., and Ray, S.: "Dielectric rod leaky-wave antennas for millimeter-wave applications", IEEE Trans., 1981, AP-29, pp 822-824.
8. Trinh, T.N.; Mittra, R.; and Paleta, Jr., R.Y.: "Horn image-guide leaky-wave antenna", IEEE Trans., 1981, MTT-29, pp 1310-1314.
9. Mittra, R., and Kastner, R.: "A spectral domain approach for computing the radiation characteristics of a leaky-wave antenna for millimeter waves', IEEE Trans., 1981, AP-29, pp 652-654.
10. Barbosa, A.M., dos Santos, A.F., and Figanier, J.: "Wave propagation on a strip grating above an impedance plane: Solution by reduction to a modified Riemann-Hilbert problem", Radio Sci., 1983, 18, n.° 4, pp. 519-531.
11. Tamir, T., and Oliner, A.A.: "Guided complex waves, Parte 1: Fields at an interface", Proc. IEE, 1963, 110, n.° 2, pp. 310-324.
12. Barbosa, A.M., dos Santos, A.F., and Figanier, J.: "Radiation field of a periodic strip grating excited by an aperiodic source", Radio Sci., 1984, 19, n.° 3, 829-839.

(*) *This mode does not contribute to the radiation field in the steepest descent representation*[11].

LIVRARIA AEIST

Acerca do artigo
SOBRE A REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DE RESULTADOS EXPERIMENTAIS

"TÉCNICA" 42:23-26, n.º 460, Out. 1980

P. DE VARENNES E MENDONÇA

O problema da regressão linear clássica põe-se no espaço cartesiano n-dimensional e visa determinar a equação do hiperplano

$$Y = a_1 + a_2 X_2 + a_3 X_3 + \ldots + a_n X_n$$

a partir da amostra $(y_i;\ x_{2i},\ x_{3i}, \ldots, x_{ni})$, com $i = 1, 2, 3, \ldots, m > n$.

Usa-se de ordinário o método dos mínimos quadrados, procedimento justificado por os seus estimadores dos parâmetros a_i serem BLUE, satisfeitas que se encontrem as condições do teorema de Gauss-Markov [v. g.: 3, p. 86].

Para valores altos de n o cálculo numérico é assaz trabalhoso, facto que leva na habitual prática hodierna a utilizar computadores.

Não assim para $n \leqslant 4$. Se muitas calculadoras electrónicas de bolso resolvem com simplicidade o problema para $n = 2$, também algumas há com as quais as constantes a_1, a_2 e a_3 da equação do plano de regressão $(n = 3)$

1) $$Y = a_1 + a_2 X_2 + a_3 X_3$$

e até mesmo as a_1, a_2, a_3 e a_4 de

2) $$Y = a_1 + a_2 X_2 + a_3 X_3 + a_4 X_4$$

encontram fácil determinação.

Quanto a 2) pode citar-se a HP - 41C equipada com a ROM dita módulo STAT I [2, p. 38]; (quanto a 1), as TI-58, TI - 58C e TI - 59 com o módulo n.º 2.

No caso do exemplo apresentado no artigo em foco pretende-se achar a equação da parábola.

3) $$Y = a_1 + a_2 X_2 + a_3 X_2^2,$$

projecção da intersecção do plano 1) com a superfície cilíndrica $X_3 = X_2^2$.

Havendo razões para seleccionar as variáveis explicativas, com consequente redução do valor de n, adoptar-se-á um método racional, como seja o algoritmo STRAP [1]. A hipótese (cuja admissão enferma sempre de subjectividade) exigida pelo processo proposto no artigo de existir um ponto cujas coordenadas são conhecidas exactamente e pelo qual se vá passar 3) é todavia em geral inconveniente, porquanto diminui arbitrária e simultaneamente o número de graus de liberdade e o coeficiente de determinação.

Com uma das calculadoras TI citadas, o processo correcto é o seguinte [4, p. 3-8 e 5-14]: PGM 05 E' x_{21} A x_{21}^2 B y_1 C x_{22} A x_{22}^2 B y_2 C ... x_{2m} A x_{2m}^2 B y_m C PGM 18 A → a_1 B → a_2 C → a_3.

Para os dados do exemplo obtém-se $a_1 = 0.9981964286$, $a_2 = -0.0019023214$ e $a_3 = 0.0000272321$.

Querendo comparar os valores estimados pela parábola de regressão com os dados, continua-se assim: (FIX 4) 0 A' x^2 B' → 0.9982 2 A' x^2 B' → 0.9945 4 A' x^2 B' → → 0.9910 6 A' x^2 B' → 0.9878 8 A' x^2 B' → 0.9847 10 A' x^2 B' → 0.9819. O resultado denota um ajustamento perfeito e torna dispensável qualquer outro método de avaliação da sua qualidade. Não há de resto dificuldade alguma em calcular o coeficiente de determinação, já que basta premir a tecla D para se obter $R^2 = 1.0000$.

É essa perfeição que mascara a inconveniência da introdução da mencionada hipótese, inconveniência que qualquer exemplo onde R^2 se afaste um tanto da unidade logo evidencia.

Original recebido para publicação em 29/4/81.

Obras citadas

[1] GIRÃO, José António & José Manuel BARROCAS 1968 **Análise de Regressão — o algoritmo STRAP.** Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, Centro de Estudos de Economia Agrária.

[2] HEWLETT-PACKARD (1980) **HP-41C Stat pac.** Corvallis, Oregon.

[3] PINDICK, Robert S. & Daniel L. RUBINFELD 1976 **Econometric Models and Economic Forecasts.** Tokio: McGraw-Hill Kogakusha Ltd.

[4] TEXAS INSTRUMENTS INCORPORATED 1977 **TI Programmable 58/59 — Applied Statistics using the power of your Solid State Software module.** Dallas, Texas.

J. LAGINHA SERAFIM e J. PAULINO PEREIRA

"DETERMINAÇÃO DAS CARACTERÍSTICAS GEOTÉCNICAS DE UM MACIÇO ROCHOSO ATRAVÉS DA CLASSIFICAÇÃO GEOMECÂNICA DE BIENIAWSKI" Técnica, n.º 2.84, Lisboa 1984, pág. 55-59

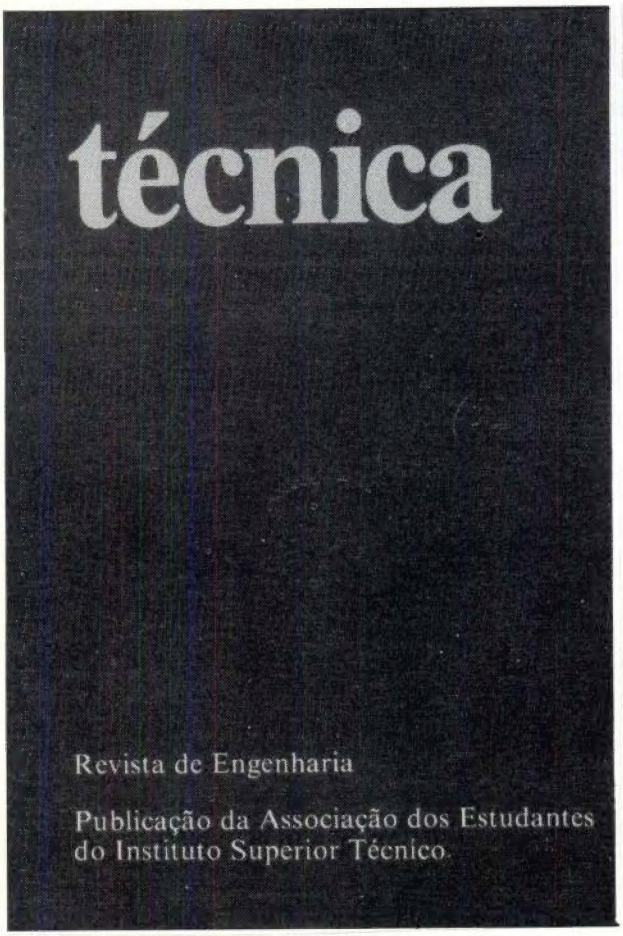
ERRATA

pag.	coluna	linha	onde se lê	deve ler-se
55	2	9	... 2: a contribuições do ...	... duas contribuições: a do ...
56	1	52	... 105_o C) ...	... 105° C) ...
59	1	3	... $E_M = \frac{RMR - 10}{40}$ ...	... $E_M = 10^{\frac{RMR - 10}{40}}$ ...
59	1	19-20	Falta uma linha	... das descontinuidades estão relacionadas não só com ...
58	Quadro C - 2a coluna		> 56 MPa	> 56 000 MPa
	Quadro D - 2a coluna		250 MPa	> 250 MPa
	Quadro D - 2a coluna		65°	> 65°
	Quadro E - 6a coluna		< 5 mm	> 5 mm

técnica

revista de engenharia

publicação trimestral



anuncie na técnica

Com uma tiragem de 5 000 exemplares e uma difusão à escala nacional e internacional a "TÉCNICA" abarca nos seus leitores quadros científicos e técnicos das mais variadas empresas, bem como grande número de professores e estudantes universitários.
Face a isto, poderemos concluir que se a "TÉCNICA" merece o apoio de todos os que de algum modo se encontram ligados à Engenharia — Escolas, Institutos de Investigação e Empresas — ela é, para além de um veículo da investigação teórica e experimental, um veículo por excelência de produtos e serviços, em suma, das actividas da vossa empresa.
Através da inserção de publicidade da vossa empresa na revista "TÉCNICA" está apoiando esta publicação e comunicando com um universo de potenciais interessados nas vossas actividades.

ANUNCIE NA "TÉCNICA", CONTACTE-NOS:
Técnica • aeist
Av. Rovisco Pais — 1000 LISBOA — Tels. 88 10 18 / 89 75 15

ISSN 0040-1714